

Design eines Monochromators für Elektronenquellen

Vom Fachbereich Physik
der Technischen Universität Darmstadt

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)
genehmigte Dissertation

von
Dipl.–Phys. Frank Kahl
aus Saarbrücken

Darmstadt 1999
D 17

Referent: Prof. Dr. rer. nat. H. Rose
Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. Dr. h.c. mult. A. Richter

Tag der Einreichung: 26.10.1999
Tag der Prüfung: 29.11.1999

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Auflösungssteigerung eines TEM	5
2.1	Grenzen der Auflösung	5
2.1.1	Aufbau eines TEM	5
2.1.2	Linsenfehler und Defokussierung	7
2.1.3	Auswirkung der Linsenfehler auf die Bildenstehung	9
2.2	Möglichkeiten zur Auflösungssteigerung	12
2.2.1	Erhöhung der Elektronenenergie	12
2.2.2	Defokusserien	14
2.2.3	Off-axis Elektronenholographie	14
2.2.4	Öffnungsfehlerkorrektur	15
2.2.5	Monochromatisierung der Beleuchtung und Öffnungsfehlerkorrektur	18
3	Anforderungen an einen Monochromator	21
3.1	Bisher vorgeschlagene Monochromatoren	25
3.1.1	Wien-Filter	25
3.1.2	Monochromator von Plies	26
3.1.3	Monochromator von Rose	26
3.2	Monochromator mit astigmatischem Strahlengang	28
4	Theorie der Strahldynamik	29
4.1	Koordinatensystem um eine gekrümmte Achse	30
4.2	Multipolentwicklung der Skalarpotentiale	33
4.3	Bewegungsgleichung des Elektrons	36
4.4	Potenzreihenentwicklung	42
4.4.1	Linearisierte Bewegungsgleichung	42
4.4.2	Paraxiale Abbildung und Fundamentalbahnen	44
4.4.3	Helmholtz-Lagrange Sätze	45
4.4.4	Nichtlinearer Anteil der Abbildung	47

5	Grundaufbau des Monochromators	57
5.1	Aufbau und Anordnung der Ablenkelemente	57
5.2	Sektorfeldablenker in SCOFF-Näherung	59
5.3	Berechnung der Elektrodenformen	61
5.4	Sektorfeldablenker mit realen Randfeldern	62
6	Paraxialer Strahlengang und Dispersion	67
6.1	Paraxiale Bahngleichungen bei Einschnittsymmetrie	67
6.2	Dispersive Bahn und Filterebene	68
6.3	Virtuelle stigmatische Abbildung	69
6.4	Runde Emissionscharakteristik der Quelle	71
7	Analytische Lösung in SCOFF-Näherung	73
7.1	Geometrieparameter	73
7.2	Paraxiale Bahngleichungen	75
7.3	Fundamentalbahnen und disperse Bahn	78
7.4	Bedingungsgleichungen	80
7.5	Physikalische Bedingungen an die Lösungen	82
7.6	Optimale analytische Näherungslösung	83
8	Semianalytische Simulation der Randfelder	87
8.1	Anforderungen an die Feldsimulation	87
8.2	Ersatzladungsverfahren	88
8.3	Lineare Approximation der Flächenladungsdichte	90
8.4	Potential eines Elementardreiecks	92
8.5	Elektrisches Feld und Multipolmomente	94
8.6	Bestimmung der Achse und der Fundamentalbahnen	96
9	Bestimmung des realistischen Designs	99
9.1	Triangulierung der Elektroden	99
9.2	Justierung der optischen Achse	104
9.3	Synthese des Gesamtsystems	108
9.4	Iterative Bestimmung des realistischen Designs	110
9.5	Berechnetes realistisches Design	113
9.6	Qualität der Energiefilterung	114
9.7	Einfluß der Bildfehler bei idealer Justierung	118
9.8	Justiertoleranzen	127
10	Einfluß des Boersch-Effekts	131
10.1	Coulomb-Wechselwirkungen im Strahl	131
10.1.1	Lateraler Boersch-Effekt	133
10.1.2	Longitudinaler Boersch-Effekt	134
10.2	Monte-Carlo Simulation	140

10.2.1 Erzeugung des Elektronenensembles	140
10.2.2 Vereinfachtes Feldmodell	142
10.2.3 Vergleich zwischen stigmatischem und astigmatischem Strahlengang	144
11 Zusammenfassung	149
A Fundamentalbahnen und dispersive Bahn	153
B Potential eines Elementardreiecks	159
C Bildfehler des realistischen Designs	167

Kapitel 1

Einleitung

Bereits 1876 erkannte Ernst Abbe [1], daß das erreichbare Auflösungsvermögen eines idealen aberrationsfreien Lichtmikroskops durch die *Beugung* begrenzt wird. Die Punktauflösungsgrenze

$$d \approx 0,6 \frac{\lambda}{n \sin \theta}$$

hängt von der Wellenlänge λ des Lichts, dem Brechungsindex n des Materials zwischen Objekt und Objektiv und dem halben Aperturwinkel θ des Objektivs ab. Je größer die numerische Apertur $n \sin \theta$ des Mikroskops ist, desto besser ist seine Auflösung $1/d$. Die verwendeten Kontaktöle zwischen Objekt und Objektiv weisen einen Brechungsindex n zwischen 1 und 2 auf. Die theoretisch erreichbare Auflösung eines Lichtmikroskops liegt daher etwas unterhalb der Lichtwellenlänge.

Die vor der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts gebräuchlichen Linsen wiesen jedoch so hohe Farb- und Öffnungsfehler auf, daß die nutzbare Apertur auf wenige Grad beschränkt war. Deshalb lag die Auflösung damaliger Mikroskope bei einem Vielfachen der Lichtwellenlänge. Bereits Anfang des 19. Jahrhunderts gelangen Ross und Amici die Entwicklung spezieller dreilinsiger Objektive mit deutlich verringertem Öffnungsfehler. Die nutzbare Apertur konnte hiermit auf über 60 Grad gesteigert werden. Für monochromatisches Licht wäre mit diesen Objektiven bereits eine Punktauflösung im Bereich der Lichtwellenlänge möglich gewesen.

Einen wesentlichen Fortschritt stellen die von Abbe 1879 [2] eingeführten Apochromaten dar, die außer dem Öffnungsfehler auch den Farbfehler über den gesamten Wellenlängenbereich des sichtbaren Lichts sehr gut kompensieren. Durch die Korrektur des Farbfehlers ist die Brennweite eines Apochromaten unabhängig

von der Wellenlänge des Lichts. Mit Hilfe eines Apochromaten gelang es Abbe bereits vor mehr als einhundert Jahren, auch für eine polychromatische Beleuchtung (zum Beispiel Sonnenlicht) die theoretische Auflösungsgrenze des Lichtmikroskops von etwas weniger als der Lichtwellenlänge zu erreichen.

Da für UV-Licht mit Wellenlängen unterhalb von etwa 150 nm bislang kein Material mit einem genügend hohen Brechungsindex zur Fertigung von Linsen bekannt ist, lassen sich mit einem Lichtmikroskop keine besseren Auflösungen als 100 nm erzielen.

Ein Ausweg aus diesem Dilemma zeichnete sich 1924 ab, als Louis de Broglie in seiner Dissertation [3] zeigte, daß Materieteilchen wie beispielsweise Elektronen auch als Materiewellen aufgefaßt werden können. Die Wellenlänge der Elektronen ist bereits bei einer Energie von einigen Kiloelektronenvolt um mehrere Zehnerpotenzen kleiner als die des sichtbaren Lichts. Drei Jahre später beschrieb Hans Busch [4], daß ein statisches rotationssymmetrisches Magnetfeld auf einen Elektronenstrahl wie eine Linse wirkt. Auf diesen physikalischen Grundlagen basiert das erste von Ernst Ruska 1933 gebaute Elektronenmikroskop [5], das mit einer Elektronenenergie von 75 keV bereits die Auflösung des Lichtmikroskops übertraf.

Wie von Otto Scherzer 1936 gezeigt wurde [6], ist sowohl der Öffnungsfehler als auch der Farbfehler für beliebige Anordnungen *statischer, raumladungsfreier, rotationssymmetrischer* Elektronenlinsen stets *positiv definit*. Aus diesem Grund gibt es im Gegensatz zur Lichtoptik in der Elektronenoptik kein nur aus Rundlinsen bestehendes System, dessen Öffnungsfehler korrigiert ist. Die Qualität der Objektive selbst von modernen Elektronenmikroskopen ist daher verglichen mit modernen korrigierten Objektiven in der Lichtoptik sehr schlecht. Ihre Güte ist mit der Güte der ersten Lichtmikroskope vergleichbar. Durch den großen Öffnungsfehler der Objektivlinse wird im Elektronenmikroskop die nutzbare Apertur auf etwa

$$\theta \approx 10 \text{ mrad}$$

begrenzt. Deshalb kann die theoretisch mögliche Auflösung im Bereich der Wellenlänge λ der Elektronen (einige Picometer) nicht erreicht werden. Moderne Elektronenmikroskope weisen eine Punktauflösungsgrenze von ungefähr $100 \cdot \lambda$ auf. Die Auflösung ist daher zwei Größenordnungen kleiner als die reziproke Elektronenwellenlänge.

Bereits von Scherzer wurden 1947 Möglichkeiten zur Korrektur des Öffnungsfehlers vorgeschlagen [7]. Der seiner Ansicht nach aussichtsreichste Weg basiert auf der Verwendung *unrunder* Elemente (Multipole), mit deren Hilfe sich negative Farb- und Öffnungsfehlerkoeffizienten erzielen lassen.

In vielen Versuchen konnte tatsächlich die Möglichkeit der Öffnungsfehler- und Farbfehlerkorrektur mit unrunder Elementen experimentell gezeigt werden (zum Beispiel [8]). Eine Auflösungsverbesserung durch den Einbau solcher Korrektoren konnte jedoch bis vor wenigen Jahren nicht nachgewiesen werden. Dies lag vor allem daran, daß die technologischen Anforderungen an die Präzision des Aufbaus, der Justierung und der elektrischen Versorgung unterschätzt wurden.

Der Durchbruch in einem Transmissionselektronenmikroskop gelang 1997 einer Arbeitsgruppe um Max Haider am Europäischen Mikrobiologischen Institut in Heidelberg mit einem Öffnungsfehlerkorrektor, der auf Hexapolelementen basiert [9, 10]. Dieser wurde 1981 von Rose [11, 12] vorgeschlagen. Entscheidend für den Erfolg war unter anderem die Entwicklung eines Verfahrens zur automatisierten, computergesteuerten Justierung des Korrektors durch Stephan Uhlemann. Die Punktauflösungsgrenze eines kommerziellen Transmissionselektronenmikroskops mit einer Elektronenenergie von 200 keV konnte mit Hilfe des Korrektors von $2,6 \text{ \AA}$ auf $1,2 \text{ \AA}$ verbessert werden. Die Auflösungsgrenze wird hierbei nicht mehr durch den Öffnungsfehler sondern durch den Farbfehler des Systems aus Objektiv und Korrektor in Kombination mit der endlichen Energiebreite der Elektronenquelle bestimmt.

Eine weitere Steigerung der Auflösung erfordert entweder eine Verbesserung der Monochromasie des Beleuchtungssystems oder aber – wie im Falle der Lichtoptik – die Entwicklung eines apochromatischen Objektivsystems mit Hilfe eines zusätzlichen Farbfehlerkorrektors. Wie jedoch von Uhlemann gezeigt wurde [13], sind für einen Farbfehlerkorrektor die Anforderungen an die Stabilität der Ströme und die Präzision der Justierung mit der heutigen Technologie keinesfalls zu erfüllen.

Um bei einer Beschleunigungsspannung von 200 kV eine Punktauflösungsgrenze von $0,8 \text{ \AA}$ zu erreichen, darf die Halbwertsbreite (FWHM) der Energieverteilung des Beleuchtungssystems 0,3 eV nicht überschreiten. Bislang ist es nicht gelungen, Elektronenquellen zu entwickeln, die bei ausreichendem Strahlstrom diesen Anforderungen genügen. Weit aussichtsreicher erscheint hingegen eine Reduzierung der Energiebreite bereits existierender thermischer Feldemissionsquellen mit Hilfe eines nachgeschalteten Energiefilters, eines sogenannten Monochromators.

Der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Monochromator vereinigt eine hohe Dispersion in der Filterebene mit einem sehr kompakten Design, das nur eine geringe Verlängerung der Mikroskopsäule notwendig macht. Der Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung innerhalb des Strahls konnte durch geeignete Wahl des Strahlengangs im Vergleich zu früheren Designvorschlägen [14, 15, 16] reduziert werden.

Zur Simulation der einzelnen Elemente des Systems wird ein weiterentwickeltes Ersatzladungsverfahren zur Berechnung elektrostatischer Felder vorgestellt, das eine präzise Bestimmung auch der höheren Bildfehler ermöglicht. Insbesondere zur Simulation von komplexen dreidimensionalen Elektrodengeometrien und dünnen Blenden werden deutlich weniger Ladungselemente benötigt als bei der Feldsimulation mit Hilfe von Punktladungen.

Der hier vorgestellte Monochromator kann zum einen die Punktauflösungsgrenze eines Transmissionselektronenmikroskops mit Öffnungsfehlerkorrektor auf $0,8 \text{ \AA}$ reduzieren, zum anderen ist er auch für Mikroskope mit abbildendem Energiefilter geeignet, die einen hohen Strahlstrom bei geringer Energiebreite der Quelle benötigen. Mit einem solchen Gerät läßt sich orts aufgelöste Spektroskopie im Sub-eV Bereich auch für Streuprozesse geringer Anregungswahrscheinlichkeit durchführen.

Kapitel 2

Auflösungssteigerung eines TEM

2.1 Grenzen der Auflösung

2.1.1 Aufbau eines TEM

In einem Transmissions-Elektronenmikroskop (TEM) formt ein Kondensorsystem aus magnetostatischen Rundlinsen ein paralleles Strahlenbündel aus Elektronen, die von einer Elektronenquelle emittiert werden. Mit dem Strahlenbündel wird der zu untersuchende Objektbereich beleuchtet. Beim Durchtritt durch das Objekt werden die Elektronen elastisch oder inelastisch gestreut. Die aus dem Objekt austretenden Elektronen werden anschließend von einem Objektivsystem aus magnetostatischen Rundlinsen in die Bildebene abgebildet (Abbildung 2.1).

Jedes Elektron des Beleuchtungsstrahls kann durch eine einzelne ebene Wellenfront beschrieben werden, die auf das Objekt trifft. Eine reale Elektronenquelle ist nicht ideal punktförmig, sondern weist eine gewisse laterale Ausdehnung auf. Daher treffen die ebenen Wellen der einzelnen Elektronen das Objekt unter unterschiedlichen Winkeln β zur Objektnormalen. Durch die Energiebreite der Quelle weisen die Elektronen zudem unterschiedliche Energieabweichungen ΔE von der Sollenergie E_0 auf. Da aufgrund ihres Fermionencharakters nicht mehr als zwei Elektronen denselben Zustand besetzen können, verschwinden alle Interferenzterme zwischen den Wellen verschiedener Elektronen durch die zeitliche Mittelung über die Beobachtungszeit. Daher ergibt sich die Gesamtbildintensität aus der Summe über die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte* der einzelnen Elektronen in der Bildebene (*inkohärente Superposition*).

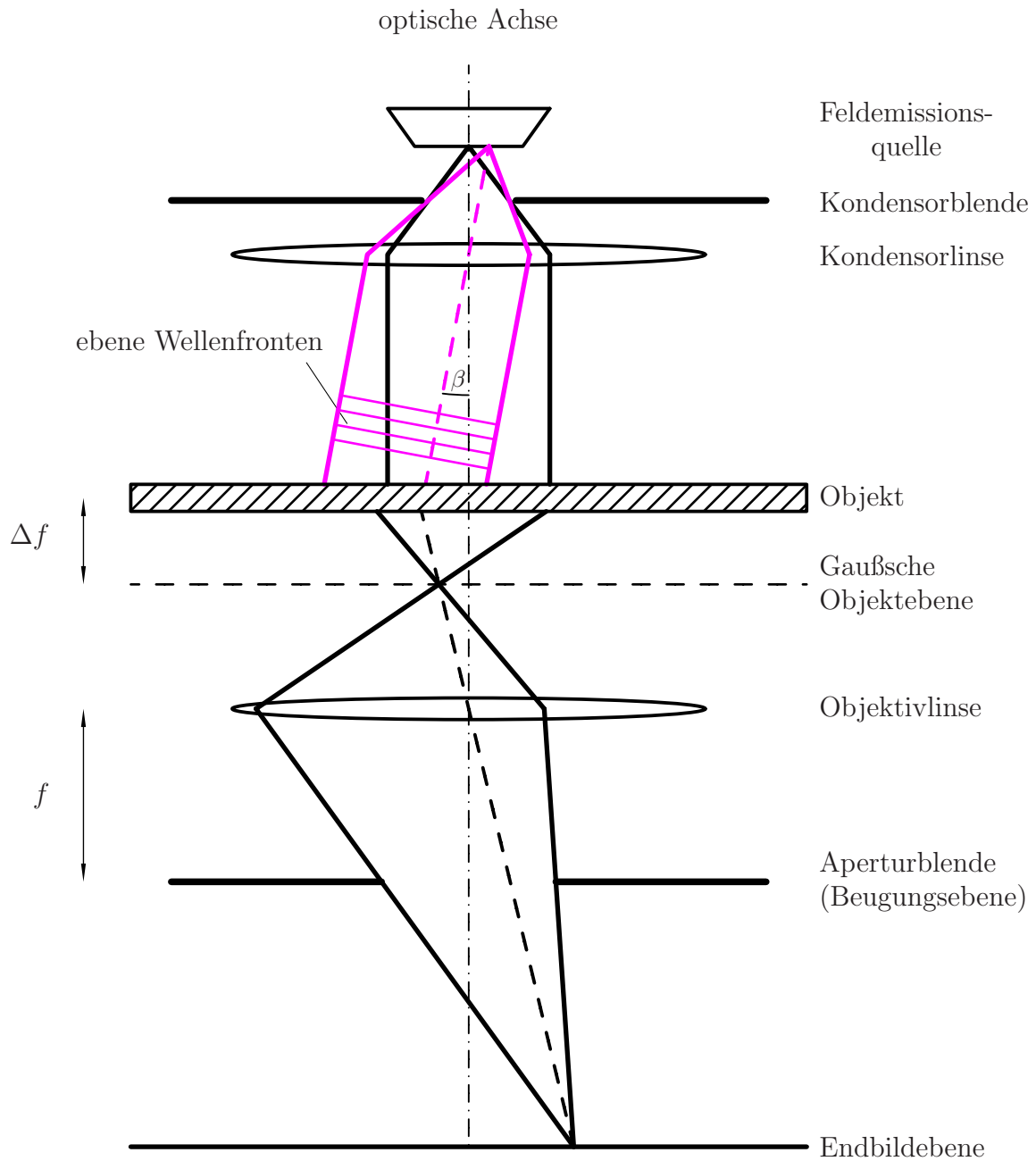


Abbildung 2.1: Funktionsschema eines TEM

2.1.2 Linsenfehler und Defokussierung

Für Elektronen, die vom Objekt aus auf der optischen Achse unter einem sehr kleinen Winkel θ starten, läßt sich die Bewegungsgleichung in sehr guter Näherung linearisieren. Dies wird als Gaußsche beziehungsweise paraxiale Näherung bezeichnet. Die Ebene, in der die Elektronen im Rahmen der paraxialen Näherung wieder die optische Achse schneiden, definiert dabei die Gaußsche Bildebene.

Nach Scherzer [6] werden Elektronen, die vom Objekt aus unter einem Winkel θ zur optischen Achse hin starten, von einer magnetostatischen Rundlinse stets so stark gebrochen, daß ihre Bahnen die optische Achse näher bei der Linse schneiden als die paraxiale Näherung voraussagt. Je größer der Startwinkel θ gewählt wird, desto näher liegt der Schnittpunkt bei der Linse. Deshalb passieren reale Elektronen die Gaußsche Bildebene mit einer lateralen Abweichung $\Delta\rho$ vom idealen Bildpunkt (Abbildung. 2.2).

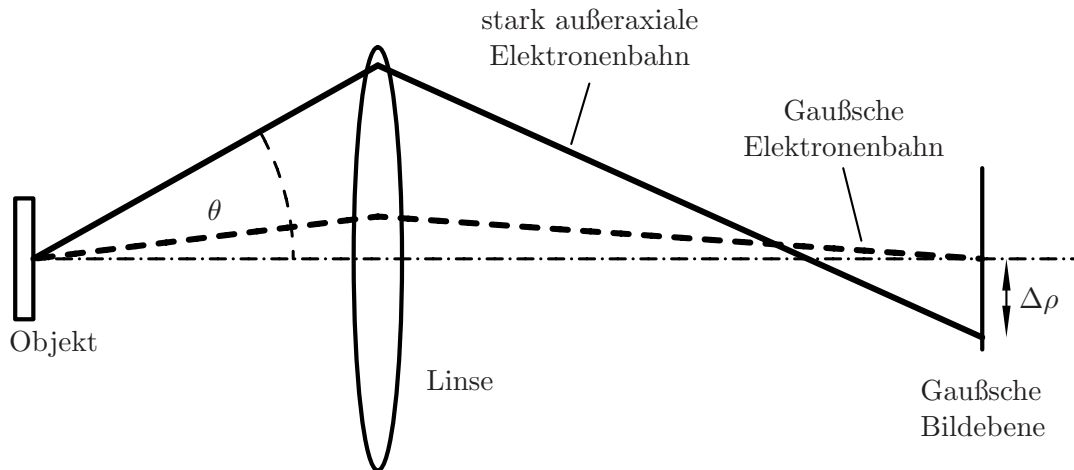


Abbildung 2.2: Auswirkung des Öffnungsfehlers

Falls das Objekt im Gaußschen Fokus liegt, enthält die Entwicklung von $\Delta\rho$ nach θ nur ungerade Potenzen *dritter und höherer* Ordnungen. Defokussiert man das Objekt, indem man es um die Strecke Δf näher zur Linse rückt (Abbildung 2.1), so tritt zusätzlich ein linearer Entwicklungsterm auf. Für die Entwicklung der Abweichung $\Delta\rho$ ergibt sich

$$\frac{\Delta\rho}{M} = C_1 \theta + C_3 \theta^3 + \dots \quad (2.1)$$

mit

$$C_1 = -\Delta f \quad . \quad (2.2)$$

Der Öffnungsfehlerkoeffizient niedrigster Ordnung ist C_3 . Die Abweichung in der Bildebene wird hierbei auf die Objektebene rückbezogen. Die Konstante M bezeichnet die Vergrößerung zwischen Objekt- und Bildebene.

Die Brennweite von Magnetlinsen hängt von der Energie E der Elektronen ab. Die Lage der Gaußschen Bildebene der Linse variiert daher proportional zur relativen Energieabweichung $\kappa = \Delta E/E_0$ der Elektronen von der Sollenergie E_0 (Abbildung 2.3). Dies entspricht einer zusätzlichen energieabhängigen Defokussierung

$$\Delta f_{\Delta E} = C_c \kappa = C_c \frac{\Delta E}{E_0} \quad (2.3)$$

des Objekts, die zur beabsichtigten Defokussierung Δf für Elektronen der Sollenergie hinzukommt. Die Proportionalitätskonstante C_c wird als Farbfehlerkonstante bezeichnet.

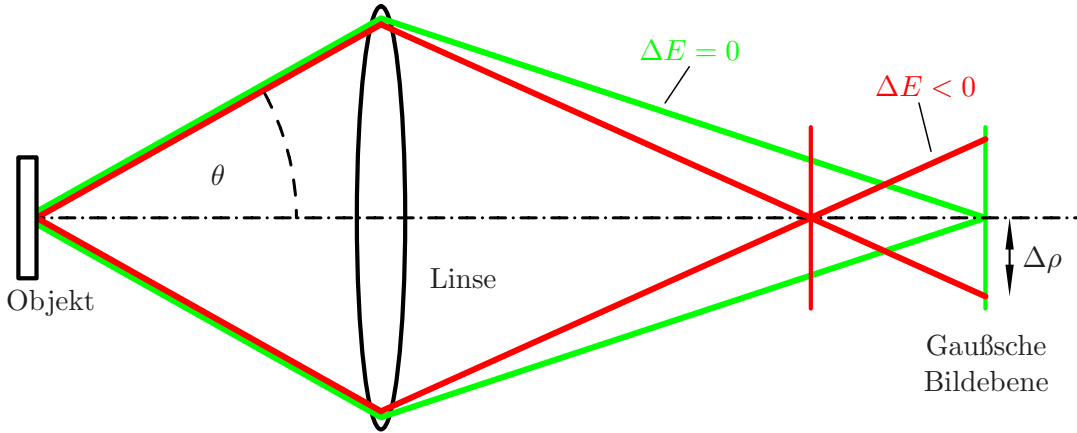


Abbildung 2.3: Auswirkung des Farbfehlers

Der Einfluß der Defokussierung sowie des Farb- und des Öffnungsfehlers kann durch eine zusätzliche Phasenschiebung der Elektronenwelle in der Beugungsebene der Objektivlinse berücksichtigt werden [17, 18, 19]

$$\exp(-i\tilde{\gamma}(q, \Delta f, C_3, C_c, \Delta E)) \quad (2.4)$$

$$\text{mit } \tilde{\gamma} = 2\pi \left(\frac{1}{4} C_3 \lambda^3 q^4 - \frac{1}{2} \left(\Delta f + C_c \frac{\Delta E}{E_0} \right) \lambda q^2 \right) \quad , \quad (2.5)$$

wobei man sich normalerweise auf die niedrigste auftretende Öffnungsfehlerkonstante C_3 beschränkt. Da im Rahmen dieser Arbeit Mikroskope behandelt werden, deren Öffnungsfehlerkonstante C_3 korrigiert ist, muß auch der Beitrag sechster Ordnung in der Raumfrequenz q zur Phasenschiebung mit berücksichtigt werden:

$$\exp(-i\gamma(q, \Delta f, C_3, C_5, C_c, \Delta E)) \quad (2.6)$$

$$\text{mit } \gamma = 2\pi \left(\frac{1}{6} C_5 \lambda^5 q^6 + \frac{1}{4} C_3 \lambda^3 q^4 - \frac{1}{2} \left(\Delta f + C_c \frac{\Delta E}{E_0} \right) \lambda q^2 \right) \quad (2.7)$$

Die Raumfrequenz q entspricht in der Beugungsebene dem lateralen Abstand $\rho = q\lambda f$ von der optischen Achse, wobei f die Brennweite der Objektivlinse und λ die Elektronenwellenlänge bezeichnet.

2.1.3 Auswirkung der Linsenfehler auf die Bildentstehung

Im Rahmen dieser Arbeit ist es für das generelle Verständnis der Bildentstehung ausreichend, sich auf schwache Phasenobjekte zu beschränken. Ein Phasenobjekt ändert beim Durchtritt nur die Phase, nicht aber die Amplitude oder die Frequenz der ebenen Elektronenwellen. Bei einem Phasenobjekt treten daher nur elastische Streuprozesse auf. Seine Wirkung kann durch eine Transmissionsfunktion der Form

$$T(\vec{\rho}) = \exp(i\chi(\vec{\rho})) \quad (2.8)$$

beschrieben werden. Hierbei ist $\vec{\rho}$ der Koordinatenvektor in der Objektebene. Die Phasenschiebung eines schwachen Phasenobjekts ist so klein, daß seine Transmissionsfunktion durch

$$T(\vec{\rho}) \approx 1 + i\chi(\vec{\rho}) \quad (2.9)$$

angenähert werden kann. Für die nachfolgenden Überlegungen nehmen wir für die Elektronen die Gaußförmigen Energie- und Winkelverteilungen

$$p(E) = \frac{2\sqrt{2\ln 2}}{\sqrt{2\pi}\Delta E_{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{2\sqrt{2\ln 2}(E - E_0)}{\Delta E_{1/2}} \right)^2 \right\} \quad (2.10)$$

$$p(\vec{\beta}) = \frac{2\ln 2}{2\pi\beta_{1/2}^2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{2\ln 2}\vec{\beta}}{\beta_{1/2}} \right)^2 \right\} \quad (2.11)$$

an. Der Betrag des Vektors $\vec{\beta}$ gibt hierbei den Kippwinkel bezüglich der Objektnormalen, seine Richtung die Kipprichtung der Wellenfront an. Bei einem

Kippwinkel von $\beta_{1/2}$ ist die Winkelverteilung gerade auf die Hälfte ihres Maximalwertes abgefallen. Die Energieverteilung weist eine Halbwertsbreite (Full-Width-Half-Maximum, FWHM) von $\Delta E_{1/2}$ auf und hat ihren Schwerpunkt bei der Sollenergie E_0 . Es läßt sich zeigen [20, 21, 22], daß für diese Verteilungen die Fouriertransformierte $I(\vec{q})$ des Bildes für schwache Phasenobjekte durch

$$I(\vec{q}) = F(\vec{q}) \cdot \mathcal{L}(q) \quad (2.12)$$

gegeben ist. Dabei ist F die Objektstreuamplitude und \mathcal{L} die Phasen-Kontrast-Übertragungs-Funktion (PKÜF),

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(q) = & -A(q) \sin(\gamma_0(q, \Delta f, C_3, C_5)) \\ & \times H_{\Delta E}(q, C_c) \cdot H_\beta(q, \Delta f, C_3, C_5) \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } H_{\Delta E}(q, C_c) &= \exp \left\{ -\frac{1}{8} \left(\frac{\pi \lambda C_c c_r \Delta E_{1/2}}{E_0 \sqrt{2 \ln(2)}} \right)^2 q^4 \right\} , \\ H_\beta(q, \Delta f, C_3, C_5) &= \exp \left\{ -\frac{\beta_{1/2}^2}{4 \ln(2) \lambda^2} \left(\frac{\partial \gamma_0}{\partial q} \right)^2 (q, \Delta f, C_3, C_5) \right\} , \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\gamma_0(q, \Delta f, C_3, C_5) := \gamma(q, \Delta f, C_3, C_5, C_c, \Delta E = 0)$$

$$\text{und } c_r = \frac{m_0 c^2 + E_0}{m_0 c^2 + E_0/2} .$$

Die Konstante m_0 gibt die Ruhemasse des Elektrons an. Eine kreisförmige Aperturblende vom Durchmesser D in der Beugungsebene der Linse filtert alle Raumfrequenzen größer als

$$q_0 = \frac{D}{2\lambda f} \quad (2.15)$$

heraus. Die Wirkung der Blende wird durch die Aperturfunktion $A(q)$ beschrieben, die für $q < q_0$ den Wert Eins und ansonsten Null annimmt. Die Raumfrequenz q entspricht gerade einer periodischen Objektstruktur mit einer Periodenlänge von $1/q$.

In der Praxis kommen zur Elektronenstatistik noch das Rauschen des Detektors sowie zusätzlich die Dämpfung durch Instabilitäten der Linsenströme und Dejustierungen der Elemente hinzu. Deshalb ist eine genaue theoretische Vorhersage für den Wert der PKÜF, oberhalb dessen die Raumfrequenzen in einem realen TEM noch mit ausreichendem Signal-Rausch-Verhältnis übertragen werden, sehr schwierig. Nach empirischen Untersuchungen an einem Philips CM 200 FEG [23] kann

$$\mathcal{L}(q) > 0,3 \quad (2.16)$$

als realistische Detektionsschwelle angenommen werden.

Man erkennt am Argument des Sinus in (2.13), daß die Linsenfehler und eine gewisse Defokussierung sogar benötigt werden, um überhaupt einen Bildkontrast im Falle eines schwachen Phasenobjekts erzielen zu können. Für eine ideale Linse und ideale Fokussierung verschwände $\sin(\gamma_0)$ und der Kontrast läge bei Null. Die Phasenschiebung in der Beugungsebene durch die Bildfehler und die Defokussierung wirkt analog zur Zernikeschen Phasenplatte [24] in der Lichtoptik.

Bei modernen Mikroskopen bewegen sich die Öffnungsfehlerkonstanten C_3 und C_5 in der Größenordnung einiger Millimeter. Bei üblichen Elektronenenergien von 100 keV bis zu 300 keV ist daher die Phasenschiebung durch C_5 für Raumfrequenzen bis weit über $(1 \text{ \AA})^{-1}$ vernachlässigbar klein gegenüber derjenigen durch C_3 .

Der Öffnungsfehler dritter Ordnung geht mit der vierten Potenz der Raumfrequenz q in die Phasenschiebung ein. Daher beginnt der Sinus jenseits der ersten Nullstelle immer rascher zu oszillieren. Zwischen den Übertragungslücken in Umgebung der Nullstellen werden Objektdetails abwechselnd mit positivem und negativem Kontrast übertragen, was zu *Artefakten* im Bild führt. Um diese Scheinstrukturen zu vermeiden, ist es naheliegend, die Defokussierung Δf so zu wählen, daß die erste Nullstelle von $\sin(\gamma_0)$ bei einer möglichst hohen Raumfrequenz q_{max} liegt und gleichzeitig das davorliegende Frequenzband mit möglichst hohem Kontrast übertragen wird. Die Aperturblende wählt man gerade so, daß nur Raumfrequenzen bis q_{max} durchgelassen werden.

Bereits 1949 wurde von Scherzer [17] unter Annahme eines idealen Punktstreuers bei axialer Beleuchtung die optimalen Mikroskopeinstellungen für maximale *Auflösung*

$$\Delta f = \sqrt{\lambda C_3}, \quad q_{max}^{(A)} = 1,4 \cdot (\lambda^3 C_3)^{-1/4} \quad (2.17)$$

sowie für maximalen *Kontrast*

$$\Delta f = 1,21 \cdot \sqrt{\lambda C_3}, \quad q_{max}^{(K)} = 1,56 \cdot (\lambda^3 C_3)^{-1/4} \quad (2.18)$$

berechnet. Der Fokus für den optimalen Kontrast wird in der Literatur als *Scherzer-Fokus* bezeichnet. Als Punktauflösungsgrenze für ein Mikroskop gibt man heute

$$d_{min} := \frac{1}{q_{max}^{(K)}} \approx 0,64 \cdot \sqrt[4]{\lambda^3 C_3} \quad (2.19)$$

an. Dies ist der kleinste periodische Objektastand, der noch ohne Kontrastum-

kehr abgebildet wird. Für die Mikroskopparameter

$$\begin{aligned} C_3 &= 1,2 \text{ mm} , & C_c &= 1,3 \text{ mm} \\ \Delta E_{1/2} &= 0,7 \text{ eV} , & \beta_{1/2} &= 0,2 \text{ mrad} \\ E_0 &= 200 \text{ keV} , & \lambda &= 2,51 \times 10^{-12} \text{ m} \end{aligned} \quad (2.20)$$

eines Philips CM 200 FEG Mikroskops ergibt sich ein Scherzer-Fokus von

$$\Delta f_{Sch} = 66 \text{ nm} . \quad (2.21)$$

Im Scherzer-Fokus erhält man eine Punktauflösungsgrenze von

$$d_{min} \approx 95 \cdot \lambda = 2,37 \text{ Å} , \quad (2.22)$$

also nahezu dem *Hundertfachen* der Wellenlänge. Die Ausnutzung der theoretisch möglichen Auflösung im Bereich der Elektronenwellenlänge ist allein mit magnetostatischen Rundlinsen aufgrund ihrer großen Öffnungs- und Farbfehler nicht zu erreichen. In der Lichthoptik hingegen sind dank fehlerkorrigierter Linsensysteme Punktauflösungsgrenzen im Wellenlängenbereich des Lichts möglich.

Die PKÜF $\mathcal{L}(q)$ sowie die Dämpfungs envelopes (2.14) H_β und $H_{\Delta E}$, die sich aus der lateralen Ausdehnung und der Energiebreite der Quelle ergeben, sind für die Mikroskopparameter (2.20) in Abbildung 2.4 aufgetragen. Durch die Dämpfungs envelopes wird das Informationslimit vorgegeben. Das Informationslimit bezeichnet die höchste durch das System übertragbare Raumfrequenz q_{il} . Für die Mikroskopparameter (2.20) ergibt sich unter Verwendung des Kriteriums (2.16) das Informationslimit

$$q_{il} = 6,1 \text{ nm}^{-1} , \quad (2.23)$$

das einer Auflösungsgrenze von $1,6 \text{ Å}$ entspricht. Wie man erkennt, wird das Informationslimit in diesem Fall durch die laterale Breite der Quelle beschränkt. Ausgehend von der PKÜF lassen sich mehrere Lösungsstrategien zur weiteren Erhöhung der Auflösung finden.

2.2 Möglichkeiten zur Auflösungssteigerung

2.2.1 Erhöhung der Elektronenenergie

Die auf den ersten Blick einfachste Methode zur Steigerung der Auflösung besteht in einer Verkleinerung der Wellenlänge λ durch Erhöhung der Energie E_0 der

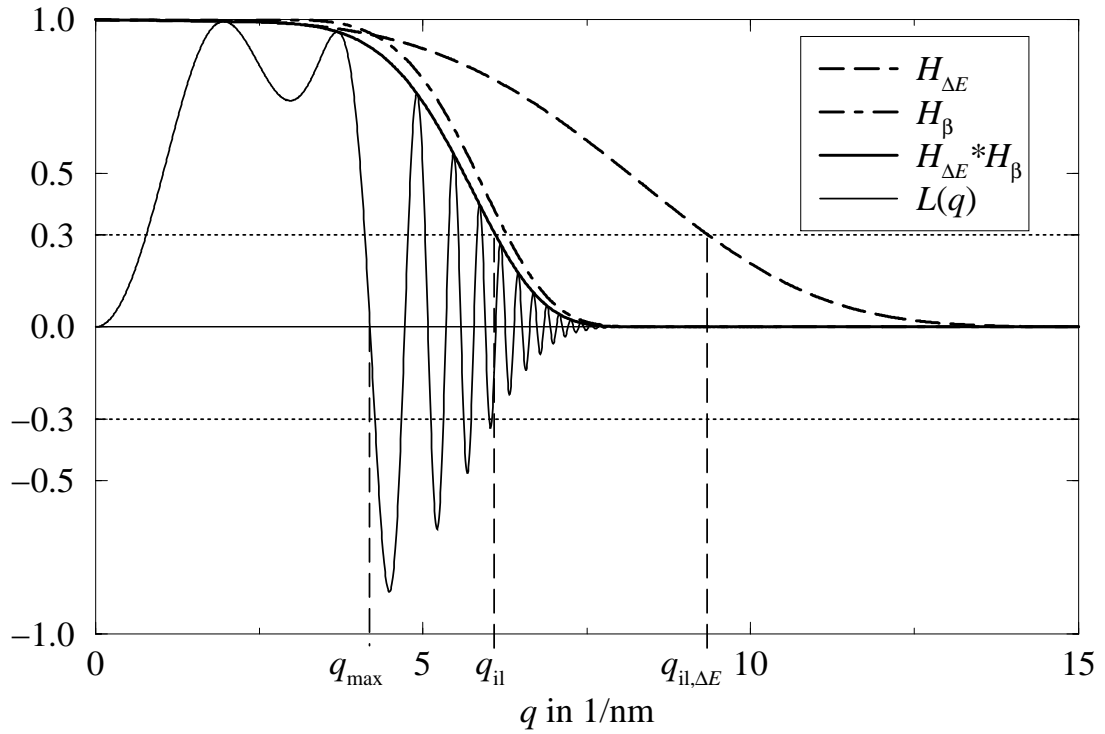


Abbildung 2.4: Die PKÜF $\mathcal{L}(q)$ sowie die Dämpfungsenveloppen für die Mikroskopparameter (2.20) unter Scherzer-Fokus.

abbildenden Elektronen. Ein solches Höchstspannungsmikroskop mit 1250 kV Beschleunigungsspannung wurde 1993 am MPI für Metallforschung in Stuttgart installiert [25]. Seine Punktauflösungsgrenze liegt nahe bei 1 Å .

Der Aufwand zum Betrieb eines solchen Mikroskops ist im Vergleich zu einem modernen 200 kV TEM groß, da wegen der technologisch aufwendigeren Hochspannungsversorgung ein eigenes Großraumlabor benötigt wird. Aus diesem Grund ist es etwa zehnmals teurer als ein modernes 200 kV Gerät.

Ein gravierender Nachteil der Höchstspannungsmikroskopie ist die Zerstörung der meisten biologischen und materialwissenschaftlichen Proben bei der Aufnahme. Der Grund liegt in der niedrigen „knock-on“ Schwelle von 150–300 kV. Primärelektronen mit Energien oberhalb der „knock-on“ Schwelle versetzen Atome innerhalb der Probe oder schlagen sie heraus. Mit zunehmender Elektronenenergie nimmt daher bei konstant gehaltenem Signal-Rausch-Verhältnis die Strahlenschädigung der Probe drastisch zu. Daher ist das Anwendungsgebiet des Höchstspannungsmikroskops auf einige wenige strahlenresistente anorganische Objekte beschränkt. Aus diesen Gründen ist eine Erhöhung der Elektronenenergie

über 200 kV zur Auflösungsverbesserung für viele wichtige Anwendungsgebiete ungeeignet.

2.2.2 Defokusserien

Nimmt man eine Serie von Aufnahmen mit jeweils unterschiedlicher Defokussierung auf, so liegen bei jeder Aufnahme die Übertragungslücken an anderen Stellen. Daher kann man aus einer Defokusserie die Raumfrequenzinformationen vom Scherzerlimit q_{max} bis hinauf zum Informationslimit rekonstruieren. Zur detaillierteren Erläuterung dieses Verfahrens wird auf [26, 27, 28] verwiesen. Das Verfahren stellt erhöhte Anforderungen an die Langzeitstabilität der Abbildungsparameter sowie der Probenposition innerhalb des Mikroskops, da eine ganze Serie von Aufnahmen unter gleichen Abbildungsbedingungen und wohldefinierten Defokusunterschieden benötigt wird. Aus diesem Grund ist auch die Objektbelastung für ein zufriedenstellendes Signal-Rausch-Verhältnis im Vergleich zum normalen TEM deutlich höher.

2.2.3 Off-axis Elektronenholographie

Bei der off-axis Elektronenholographie passiert nur ein Teil der ebenen Welle das Objekt, der andere Teil läuft ungestreut am Objekt vorbei. Mit Hilfe eines elektrostatischen Biprismas kurz vor der Endbildebene wird die Objektwelle mit der ungestörten Referenzwelle zur Interferenz gebracht.

Bildet man die Fouriertransformation des Bildes, so erhält man außer einem Zentralbereich, der die Interferenz der Streuwelle mit sich selbst enthält, noch zwei Seitenbänder. Diese Seitenbänder entstehen durch die lineare Überlagerung von Objekt- und Referenzwelle. Weiterführende Details können beispielsweise in [22, 29, 30, 31, 32, 34] nachgelesen werden.

Die räumliche Trennung der Seitenbänder bewirkt, daß in der PKÜF

$$\mathcal{L}(q) = -A(q) \exp(-i\gamma_0(q, \Delta f, C_3)) \cdot H_{\Delta E}(q, C_c) \cdot H_{\beta}(q, \Delta f, C_3) \quad (2.24)$$

für ein solches Seitenband anstelle des Sinus die komplexe Exponentialfunktion auftritt. Es wird ein Mikroskop mit unkorrigierter Öffnungsfehlerkonstante C_3 vorausgesetzt und deshalb der Beitrag von C_5 vernachlässigt. Da der Kontrast, mit der ein periodisches Objektdetail übertragen wird, proportional zum Betrag $|\mathcal{L}(q)|$ der PKÜF ist, treten keinerlei Übertragungslücken mehr bis zum Informationslimit auf.

Kennt man den Defokus Δf und die Öffnungsfehlerkonstante C_3 , so läßt sich die Amplitude und die Phase der Wellenfunktion unmittelbar hinter dem Objekt rekonstruieren, indem man mit Hilfe des Computers die Fouriertransformierte des Bildes (2.12) durch die PKÜF dividiert und eine Fourierrücktransformation durchführt.

Im Falle der Elektronenholographie wird anstelle des Scherzer–Fokus der sogenannten Lichte–Fokus [33]

$$\Delta f_L = 0,75 C_3 \lambda^2 q_L^2 \quad (2.25)$$

gewählt, der in dem Raumfrequenzbereich von 0 bis q_L , der bei der Rekonstruktion berücksichtigt werden soll, die Änderungsgeschwindigkeit $|\partial\gamma_0/\partial q|$ der Phase der PKÜF minimiert:

$$g(\Delta f_L) \leq g(\Delta f) \quad \text{für} \quad \Delta f \neq \Delta f_L \quad \text{mit} \quad g(\Delta f) := \max_{q \in [0, q_L]} \left| \frac{\partial \gamma_0}{\partial q} \right| \quad . \quad (2.26)$$

Die Anzahl der zur hinreichend genauen Diskretisierung der PKÜF notwendigen Samplepunkte ist dann am kleinsten.

Darüber hinaus minimiert der Lichte–Fokus die Dämpfung durch die Quellbreite im Raumfrequenzbereich von 0 bis q_L und schiebt so die Begrenzung des Informationslimits durch die Quellausdehnung zur Raumfrequenz q_L hinaus. Leider ist dies nicht beliebig weit möglich, da H_β im Inneren des Raumfrequenzbereichs $[0, q_L]$ um so stärker einbricht, je größer q_L gewählt wird.

Daher ist es zum Beispiel im Falle der Mikroskopparameter (2.20) nicht sinnvoll, für q_L das durch die Energiebreite der Quelle vorgegebene Informationslimit $q_{il, \Delta E} = 9,3 \text{ nm}^{-1}$ zu wählen (siehe Abbildung 2.4). Bei dieser Wahl bricht nämlich H_β bis auf die Detektionsschwelle von 0,3 ein und es entsteht eine Übertragungslücke. Sinnvoll ist eine Beschränkung auf etwa $q_L = 8 \text{ nm}^{-1}$. In diesem Fall erhält man die in Abbildung 2.5 aufgetragenen Dämpfungenveloppen. Das Informationslimit unter Lichte–Fokus liegt dann bei $q_{il} = 8 \text{ nm}^{-1}$, was einer Auflösung von $1,25 \text{ Å}$ entspricht. Für das normale Ruhbildmikroskop erscheint der Lichte–Fokus jedoch wegen der großen Zahl von Übertragungslücken wenig sinnvoll.

2.2.4 Öffnungsfehlerkorrektur

Wie zuvor bereits dargelegt wurde, ist für die Auflösungsbeschränkung magnetostatischer Rundlinsen in erster Linie die große positive

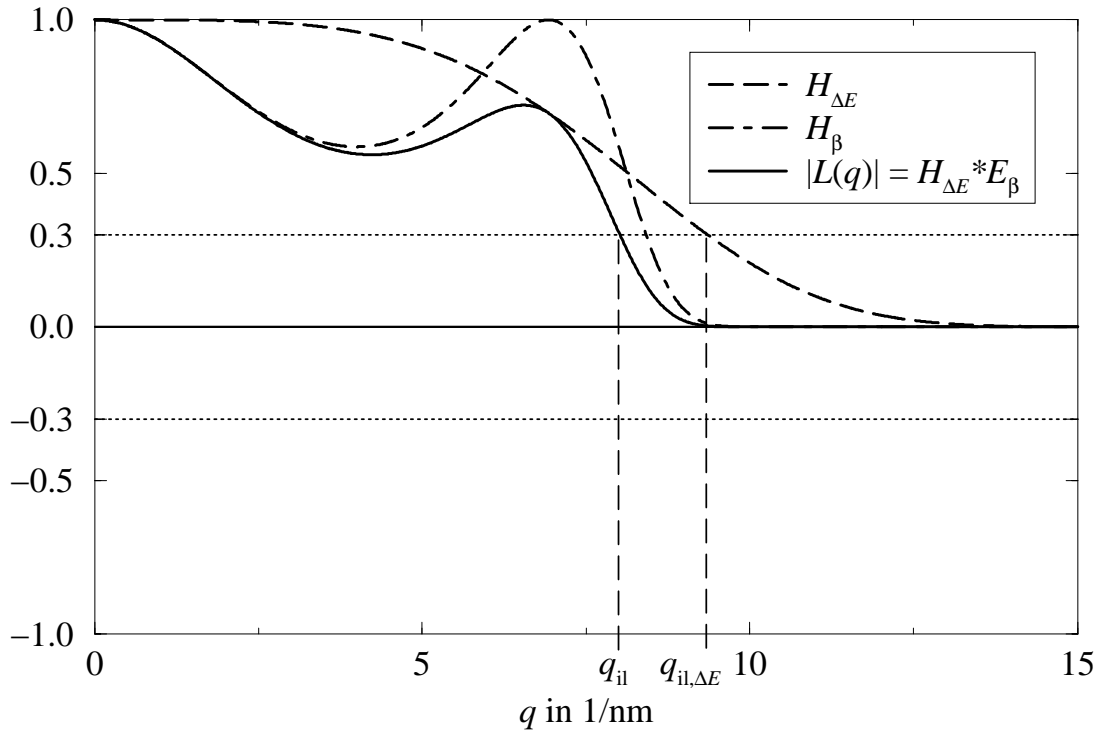


Abbildung 2.5: Der Imaginärteil der PKÜF für Elektronenholographie sowie die Dämpfungenveloppen für die Mikroskopparameter (2.20) unter Lichte-Fokus.

Öffnungsfehlerkonstante C_3 verantwortlich. Ist C_3 mit Hilfe eines Korrekturlements frei einstellbar, so kann man C_3 und Δf simultan unter Beibehaltung des Scherzer-Fokus (2.18) soweit verkleinern, daß die erste Nullstelle der PKÜF mit dem chromatischen Informationslimit $q_{il,\Delta E}$ übereinstimmt. Aufgrund der Abhängigkeit der Enveloppen H_β (2.14) von $\partial\gamma_0/\partial q$ wird durch die Reduktion von Öffnungsfehler und Defokussierung auch die Dämpfung durch die laterale Quellbreite sehr viel schwächer, so daß die erreichbare Auflösung mit Öffnungsfehlerkorrektur nur noch durch das chromatische Informationslimit begrenzt wird.

Nach dem Scherzer-Theorem [17] weisen rotationssymmetrische, raumladungsfreie elektro- oder magnetostatische elektronenoptische Systeme stets einen positiven Öffnungsfehler auf, sofern entlang der Achse das elektrische Potential stets größer als das Kathodenpotential ist. Eine Zone mit einem kleineren elektrischen Potential wirkt wie ein Spiegel, an dem der Elektronenstrahl reflektiert wird. Zur Öffnungsfehlerkorrektur kommen daher nur unrunde Systeme oder rotationssymmetrische Elektronenspiegel in Frage.

Mit Hilfe eines Elektronenspiegels lassen sich tatsächlich sowohl negative Öffnungs- als auch Farbfehler zur Korrektur der Linsenaberrationen erzeugen [35, 36]. Leider läßt sich dieses Prinzip aufgrund der begrenzten Isolationsfähigkeit des Vakuums nur im Mittelspannungsbereich bis etwa 60 keV Elektronenenergie einsetzen. Ein mit Hilfe eines solchen Spiegels korrigiertes „Low-Energy-Electron-Microscope“ (LEEM) wird zur Zeit im Rahmen eines vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Verbundprojekts gebaut und getestet [37, 38].

Auf Hexapolelementen basierende Öffnungsfehlerkorrektoren für höhere Elektronenenergien wurden unter anderem 1988 von Shao [39] und 1981 von Rose [11, 12] vorgeschlagen. Beide Systeme erzeugen eine runde Abbildung und besitzen einen negativen Öffnungsfehler. Im Gegensatz zum System von Shao gelingt es dem Design von Rose, durch innere Symmetrien die für die Abbildung genügend großer Objektbereiche hinderlichen außeraxialen Fehler klein zu halten.

Dieser Korrektor wurde im Rahmen des SÄTEM-Projekts (Sub-Ångström-TEM) von einer Arbeitsgruppe unter der Leitung von Haider am Europäischen Mikrobiologischen Institut in Heidelberg gebaut. In einem konventionellen Mikroskop des Typs Philips CM 200 FEG konnte mit dem Hexapolkorrektor 1997 erstmals erfolgreich eine Auflösungsverbesserung nachgewiesen werden [9, 10].

Die Parameter des Mikroskops im unkorrigierten Zustand sind in (2.20) aufgeführt. Der Hexapolkorrektor erhöht den Farbfehler C_c um zirka 30% von 1,3 mm auf 1,7 mm, wodurch das maximale chromatische Informationslimit $q_{il,\Delta E}$ auf 8 nm^{-1} sinkt. Dies entspricht einer Auflösung von etwa $1,25 \text{ Å}$. Für die Werte $C_3 = 21 \text{ μm}$ und $\Delta f = 8,2 \text{ nm}$ wird die PKÜF bis zum chromatischen Informationslimit optimiert (Abbildung 2.6). Die Öffnungsfehlerkonstante $C_5 = 4 \text{ mm}$ des Systems mit Korrektor beeinflußt für Raumfrequenzen über $(1 \text{ Å})^{-1}$ die Form der PKÜF bereits merklich.

Die Dämpfung durch die laterale Quellbreite ist durch den sehr kleinen Öffnungsfehler C_3 bis weit unterhalb von 1 Å vernachlässigbar klein, so daß das Informationslimit nur noch durch die Energiebreite der Quelle begrenzt wird (Abbildung 2.6). Im Experiment konnte die theoretisch mögliche Verbesserung der Auflösung bis hinauf zum Informationslimit nachgewiesen werden [9].

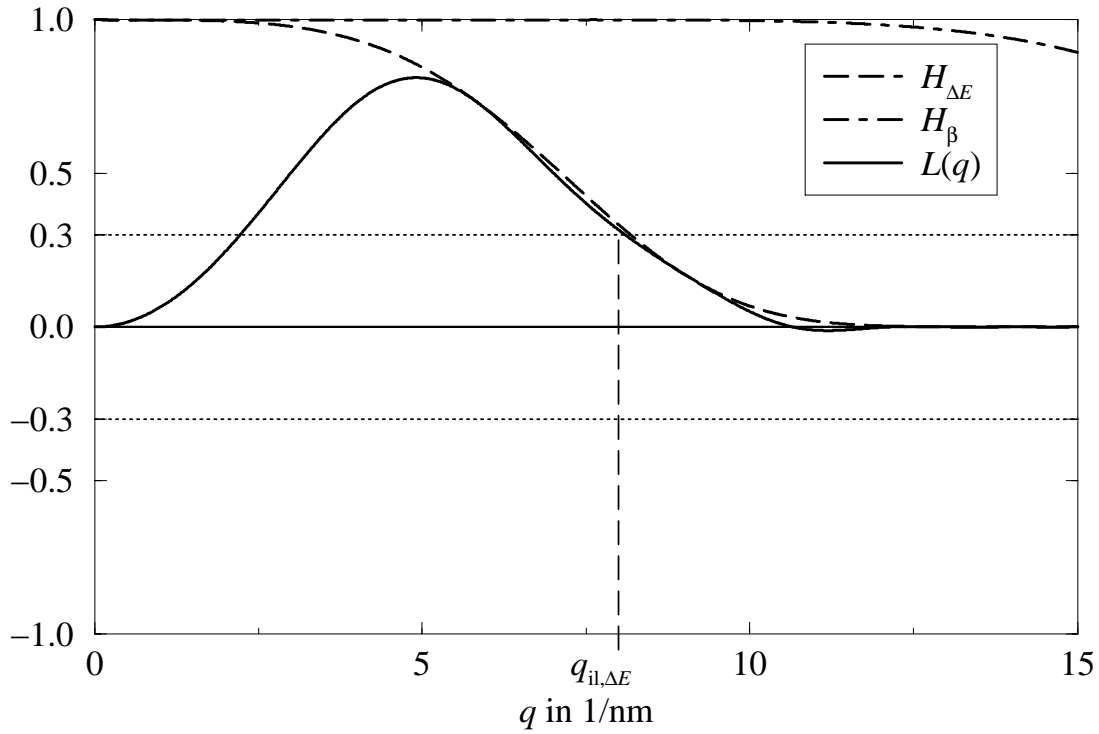


Abbildung 2.6: PKÜF, sowie die Dämpfungenveloppen für das CM 200 FEG mit Hexapolkorrektor.

2.2.5 Monochromatisierung der Beleuchtung und Öffnungsfehlerkorrektur

Um die Auflösung auf Werte unterhalb von 1 \AA zu steigern, ist zusätzlich zum Hexapolkorrektor eine deutliche Verringerung der Farbfehlerkonstanten C_c oder der Energiebreite der Quelle notwendig.

Mögliche Korrekturverfahren für die Farbfehlerkonstante der Objektivlinse in einem Hochauflösungs-TEM wurden von Uhlemann in seiner Dissertation [13] untersucht. Die für einen solchen Korrektor notwendigen Anforderungen an die Stromstabilitäten sowie die erforderlichen Feldstärken innerhalb der einzelnen Korrektorelemente sind mit heutiger Technologie in keinem Fall zu erfüllen.

Daher ist eine Auflösungssteigerung nur durch die Verringerung der Energiebreite des Elektronenstrahls zu erreichen. Um eine Auflösung von deutlich unter 1 \AA zu erhalten, ist jedoch ein FWHM $\Delta E_{1/2}$ der Energieverteilung von höchstens $0,3 \text{ eV}$ erforderlich. Als chromatisches Informationslimit erhält man

dann etwa $0,8 \text{ \AA}$. Die PKÜF für die hierfür optimalen Mikroskopeinstellungen $C_3 = 1,31 \text{ }\mu\text{m}$ und $\Delta f = 3,51 \text{ nm}$ ist in Abbildung 2.7 zusammen mit der PKÜF für $\Delta E_{1/2} = 0,7 \text{ eV}$ aufgetragen. Ein erfreulicher Nebeneffekt der weiteren Ver-

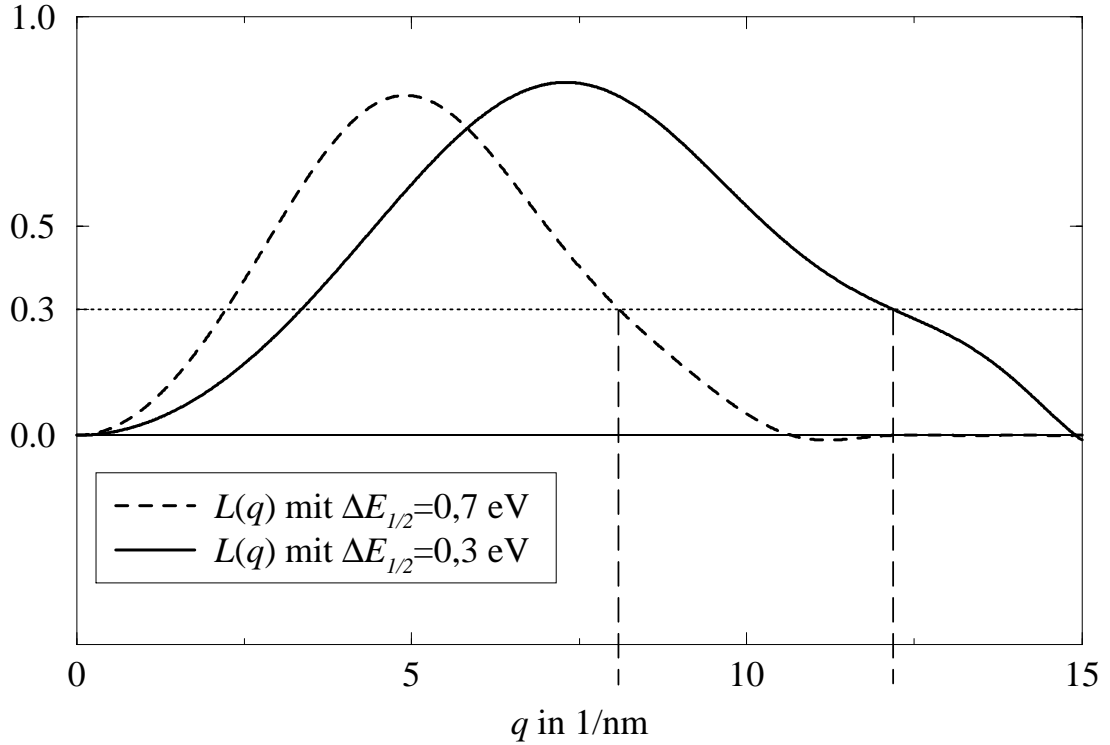


Abbildung 2.7: Optimierte PKÜF für das SÄTEM für 0,7 eV und 0,3 eV Energiebreite der Quelle.

kleinerung von C_3 und Δf ist eine abermalige Verringerung der Dämpfung durch die laterale Quellbreite. Man kann für schwache Phasenobjekte für den Halbwertsradius $\beta_{1/2}$ der Beleuchtungswinkelverteilung Werte von bis zu $\beta_{1/2} = 2 \text{ mrad}$ zulassen, ohne daß sich die Quellbreitendämpfung nennenswert bemerkbar macht. Das entspricht dem zehnfachen Halbwertsradius des Philips CM 200 FEG, daß als Grundlage für den Prototyp des SÄTEM verwendet wird.

Die natürliche Energiebreite sowohl von thermischen als auch von kalten Feldemissionskathoden und die zusätzliche Energieverbreiterung durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Kathodennähe (Boersch-Effekt) [65, 66] bei hinreichend großen Strömen (einige Nanoampere) setzen der weiteren Optimierung der Energiebreite Grenzen. Ein FWHM von 0,5 eV - 0,6 eV wird für beide Quelltypen als gerade noch realisierbar betrachtet. Auch neuere Entwicklungen wie z. B. die Quelle von Fink [40], die kohärente Elektronen aus einer monoatomaren Spitze

emittiert, sind noch weit von der industriellen Einsatzreife entfernt. Im Dauerbetrieb gibt es große technische Probleme beim Erzielen eines hinreichend hohen Strahlstroms und bei der Haltbarkeit der Spitze. Eine aussichtsreichere Möglichkeit ist eine nachträgliche Monochromatisierung bestehender Quellen durch einen Energiefilter, im folgenden *Monochromator* genannt.

Kapitel 3

Anforderungen an einen Monochromator

Falls man die Elektron–Elektron–Wechselwirkung innerhalb des Strahls vernachlässigt, ist der *axiale* Richtstrahlwert

$$R_{ax} = \frac{d^2 I}{dA d\Omega} \quad (3.1)$$

eines Elektronenstrahls entlang der optischen Achse konstant, sofern keine Beschleunigung der Elektronen entlang der Achse erfolgt und keine dispersiven Elemente oder beugenden Blenden im Strahlengang vorkommen [41, 42]. Der Richtstrahlwert gibt an, wieviel Strom von einem von der Achse senkrecht durchsetzten infinitesimalen Flächenelement dA in den infinitesimalen Raumwinkel $d\Omega$ in Richtung der Achse emittiert wird. Dies gilt auch für Systeme mit Abbildungsfehlern, da die Erhaltung des Richtstrahlwerts nur die Gültigkeit der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen und konservative Kräfte voraussetzt.

Die charakteristische Größe für die Güte einer Elektronenquelle im Elektronenmikroskop ist jedoch ihr *gemittelter* Richtstrahlwert

$$R = \frac{I}{\Delta A \Delta \Omega} \quad , \quad (3.2)$$

der angibt, wieviel Strom von der *endlichen* effektiven Fläche ΔA der Quelle in den *endlichen* Raumwinkel $\Delta \Omega$ emittiert wird. Um das Objekt möglichst homogen auszuleuchten, begrenzt man mit Hilfe einer Stromselektionsblende den Öffnungswinkel des Emissionswinkelraumwinkels $\Delta \Omega$ auf einige Millirad. Dann sind für moderne thermische Feldemissionsquellen die Leuchtdichte über die effektiven Quellfläche ΔA und der Winkelstrom über den Emissionsraumwinkel

$\Delta\Omega$ nahezu konstant. Vernachlässigt man die Abbildungsfehler, so bleibt der gemittelte Richtstrahlwert ebenfalls entlang der Achse erhalten und die Ausleuchtung bleibt homogen. Bei Anwesenheit von Abbildungsfehlern werden hingegen die Zwischenbilder der Quelle durch die Fehlerkaustik verformt und aufgeweitet. Hierdurch geht die Homogenität der Beleuchtung verloren und der gemittelte Richtstrahlwert sinkt. Daher muß der Einfluß der Abbildungsfehler beim Design eines Monochromators mitberücksichtigt werden.

Der Raumwinkel $\Delta\Omega_{Obj}$, unter dem man ein Objektfeld vorgegebener Größe ausleuchten muß, um ausreichend Strahlstrom zu erhalten, ist umgekehrt proportional zum Richtstrahlwert der Quelle

$$R \sim \frac{1}{\Delta\Omega_{Obj}} \quad . \quad (3.3)$$

Zwischen dem Raumwinkel und dem Semikonvergenzwinkel der Beleuchtung besteht die Beziehung

$$\Delta\Omega_{Obj} = \pi\beta_{1/2}^2 \quad . \quad (3.4)$$

Da durch die Öffnungsfehlerkorrektur der noch zulässige Semikonvergenzwinkel um den Faktor 10 gegenüber dem des unkorrigierten Mikroskops liegt (siehe vorhergehender Abschnitt), darf der Monochromator im Falle des SÄTEM den Richtstrahlwert der Quelle allerhöchstens um den Faktor 100 verkleinern.

Es ist jedoch geplant, den Monochromator nicht nur in Mikroskopen mit Öffnungsfehlerkorrektor sondern auch in Geräten mit einem neuartigen abbildenden Energiefilter (MANDOLINEN-Filter [43, 44]) einzusetzen. Aufgrund der hohen Dispersion dieses Filters erlaubt ein solches Mikroskop orts aufgelöste Spektroskopie im Sub-eV Bereich. Die erreichbare Energieauflösung wird dabei durch die Energiebreite des Beleuchtungssystem begrenzt.

Da in der ersten Ausbaustufe dieses Mikroskops der Einsatz eines Öffnungsfehlerkorrektors nicht vorgesehen ist, sind im Gegensatz zum SÄTEM die Anforderungen an die laterale Kohärenz der Quelle *nicht* reduziert. Deshalb sollte der Verlust an Richtstrahlwert durch den Monochromator so klein wie möglich gehalten werden. Um mit Hilfe eines Filtermikroskops auch seltene Anregungsprozesse bei akzeptabler Beleuchtungszeit untersuchen zu können, sollte der Monochromator auch in der Lage sein, große Beleuchtungsströme zu liefern.

In der Praxis erfährt der Elektronenstrahl hinter der Quelle nochmals eine Energieverbreiterung von etwa $\Delta E_{1/2}^{(B)} = 0,2$ eV durch die Instabilität der Hauptbeschleunigungsspannung. Daher muß ein Monochromator, der zwischen Quelle

und Hauptbeschleunigung eingebaut wird, die Halbwertsbreite der Energieverteilung mindestens auf $\Delta E_{1/2}^{(M)} = 0,2$ eV reduzieren, damit die Halbwertsbreite der Energieverteilung *nach* der Hauptbeschleunigung mit

$$\Delta E_{1/2} \approx \sqrt{\Delta E_{1/2}^{(M)2} + \Delta E_{1/2}^{(B)2}} = 0,28 \text{ eV} \quad (3.5)$$

unterhalb von der in Abschnitt 2.2.5 geforderten Halbwertsbreite von $\Delta E_{1/2} = 0,3$ eV bleibt. Die Quelle oder ihr Zwischenbild sollten dabei vom Monochromator *stigmatisch* abgebildet werden.

Für die Objektbeleuchtung nach der Filterung sollte ein Mindeststrom von 1 nA bis 3 nA im Falle des SÄTEM beziehungsweise von 20 nA bis 30 nA im Falle eines Filtermikroskops zur Verfügung stehen. Zur Filterung benötigt der Monochromator Elemente mit möglichst hoher Dispersion, um die Elektronen unerwünschter Energie mit Hilfe von Kreis- oder Schlitzblenden entfernen zu können. Hierbei ist zu beachten, daß die Fertigung von Blenden unter $3 \mu\text{m}$ Durchmesser sehr aufwendig ist. Deshalb sollten kleinere Blendendurchmesser vermieden werden. Um eine Energiebreite von 0,3 eV zu erreichen, muß die Dispersion in der Filterebene daher mindestens $10 \mu\text{m}/\text{eV}$ betragen.

Aus diesem Grund ist es sinnvoll, einen Monochromator unmittelbar hinter der Quelle bei einer Beschleunigungsspannung von einigen Kilovolt *vor* der Hauptbeschleunigung auf 200 kV einzusetzen. Alternativ dazu kann ein energieretardierendes und nach der Filterung wieder beschleunigendes Design verwendet werden. Das bedeutet, daß zumindest der Abschnitt des Monochromators, bei dem die Elektronen auf einige Kiloelektronenvolt abgebremst werden, bei einem Potential von nahezu 200 kV gegen Erde arbeiten muß.

Um einen Richtstrahlwertverlust zu vermeiden, muß der Monochromator in der Ausgangsebene sowohl orts- als auch winkeldispersionsfrei sein. Ansonsten würde das Quellbild in Dispersionsrichtung nach der Energieabweichung sortiert auseinandergezogen und die Elektronen würden je nach Energieabweichung in einen anderen Raumwinkel emittiert. Durch die nach Energien lateral sortierte Emission wäre der Einfallswinkel der Elektronen auf das Objekt proportional zu ihrer Energieabweichung. Dies würde zu Bildartefakten führen.

Ein großes Problem bei niedrigen Elektronenenergien und vielen stigmatischen Crossovern im Strahlengang sind Stöße zwischen den Elektronen durch Coulomb-Wechselwirkung in der Umgebung der Crossover. Im Laborsystem führt dies zu einem Energieübertrag zwischen den Elektronen (energetischer Boersch-Effekt) und zu einer Winkelverkipfung ihrer Bahn (lateraler Boersch-Effekt). Intensive theoretische Analysen dieser Problematik finden sich in [66].

Die nachträgliche Energieverbreiterung durch den Boersch-Effekt ist jedoch nicht der einzige kritische Effekt. Nach dem Boersch-Stoß weist ein Elektron eine für seinen Bahnpunkt falsche Energie auf, so daß dieses Elektron nach dem Durchlaufen des Monochromators eine Restdispersion besitzt. Hierdurch wird das Quellbild auf die gleiche Weise verbreitert wie bei einem System mit nicht verschwindender Dispersion.

Für ein realistisches System, bei dem die Verteilung der Energieabweichungen durch den Boersch-Effekt eine Halbwertsbreite von 0,1 eV aufweist, erhöht sich im schlimmsten Fall die Halbwertsbreite der gefilterten Energieverteilung von 0,2 eV auf etwa

$$\sqrt{0,1^2 + 0,2^2} \text{ eV} \approx 0,22 \text{ eV} \quad . \quad (3.6)$$

In diesem Fall erhält man eine Halbwertsbreite nach der Hauptbeschleunigung von $\Delta E_{1/2} = 0,3 \text{ eV}$, was nach Abschnitt 2.2.5 für eine Auflösungsgrenze von 0,8 Å ausreicht.

Hingegen liegt das Bild von Elektronen, die in Umgebung der Filterebene durch den Boersch-Effekt um $\pm 0,05 \text{ eV}$ an Energie gewinnen, bei einer realistischen Restdispersion von $10 \mu\text{m}/\text{eV}$ in der Ausgangsbildebene des Monochromators um $\pm 500 \text{ nm}$ gegenüber der Sollposition versetzt.

Um welchen Faktor hierdurch der Quelldurchmesser anwächst, hängt von der Vorvergrößerung der Quelle vor dem Monochromator ab. Je höher die Vorvergrößerung ist, desto geringer sind die relative Boersch-Verbreiterung im Verhältnis zum Quelldurchmesser und damit der Richtstrahlwertverlust. Würde man den effektiven Crossover einer Feldemissionsquelle, dessen Durchmesser in der Größenordnung von 20 nm liegt, um den Faktor 10 vorvergrößern, so würde sich im obigen Fall der Durchmesser des Quellbildes in Dispersionsrichtung durch den Boersch-Effekt von 200 nm auf etwa 1200 nm vergrößern. Dadurch würde der Richtstrahlwert auf 17 % des Ausgangswerts sinken. Falls man die Quelle hingegen ohne Vorvergrößerung in den Monochromator abbilden würde, fiel der Richtstrahlwert auf etwa 2 % des Ausgangswertes ab.

Die Energieselektion funktioniert nur, wenn die zur Selektion in die Filterebene abgebildete Quelle kleiner als die Selektionsschlitzbreite bleibt. Daher begrenzt der durch die angestrebte Energieverbreiterung vorgegebene Durchmesser der Selektionsblende von $3 \mu\text{m}$ die Quellvergrößerung. Für die obigen Beispielwerte beträgt die maximal zulässige Vorvergrößerung etwa 150.

Außerdem sollte die Gesamtlänge des Monochromators einschließlich des vorgeschalteten Kondensorlinsensystems 10 cm bis 15 cm möglichst nicht überschreiten, um die Empfindlichkeit der Mikroskopsäule gegenüber Schwingungen nicht

zu sehr zu erhöhen. Daher sollte das Kondensorsystem idealerweise nur aus einer Linse bestehen, die möglichst dicht vor dem Monochromator sitzt. Die erreichbare Vorvergrößerung der Quelle wird hierdurch auf etwa 10 beschränkt.

3.1 Bisher vorgeschlagene Monochromatoren

3.1.1 Wien-Filter

In einem Wien-Filter heben sich für Elektronen der Sollenergie die transversale Kraftwirkung von zueinander senkrechten elektrischen und magnetischen Dipolfeldern auf, so daß die optische Achse gerade bleibt und trotzdem für Elektronen mit einer Energie von einigen Kiloelektronenvolt eine hohe Dispersion im Bereich von 15 cm bis 30 $\mu\text{m}/\text{eV}$ erreicht wird.

Zur Korrektur des Farb- und des Öffnungsfehlers in Niederspannungs-Elektronenmikroskopen wurde von Rose [14] ein inhomogenes Wien-Filter mit elektrischen und magnetischen Quadrupolfeldern vorgeschlagen. Dieses System eignet sich auch als Monochromator, da in seiner Ausgangsebene die Dispersion verschwindet. In der Mittelebene wird die Dispersion hingegen maximal, so daß die Energiefilterung dort erfolgen kann.

Von Nachteil ist die Verwendung *magnetischer* Elemente. Da der Monochromator bei einem Potential von nahezu 200 kV gegen Erde arbeitet, müssen die benötigten Konstantstromquellen bei nahezu 200 kV gegen Erde betrieben werden. Der hierfür notwendige technologische Aufwand ist weit höher als der Betrieb von Konstantspannungsquellen für elektrostatische Elemente. Daher sind Monochromatordesigns vorzuziehen, die auf rein elektrostatischen Elementen basieren.

Ein weiterer Nachteil ist die große Baulänge. Um die mindestens notwendige Dispersion von 10 $\mu\text{m}/\text{eV}$ bei einer Beschleunigungsspannung von 3 kV zu erreichen, muß der Abstand zwischen Eintritts- und Austrittsquellbild bereits 13,3 cm betragen. Hierbei ist die Länge des Kondensorsystem noch nicht mitberücksichtigt. Eintritts- und Austrittsquellbild liegen dabei in der Eingangs- beziehungsweise Ausgangsebene des Wien-Filters, wie in Abbildung 3.1 gezeigt. Insgesamt treten innerhalb des Filters drei stigmatische Quellcrossover auf.

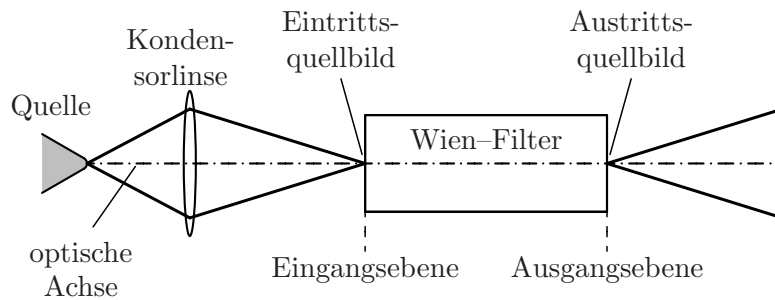


Abbildung 3.1: Wien-Filter als Monochromator

3.1.2 Monochromator von Plies

Von Plies wurde 1978 ein rein elektrostatischer Monochromator vorgeschlagen, der auf einem einzelnen Zylinderspiegelanalysator basiert [15]. Da die Filterung bei diesem Design jedoch hinter dem Analysator erfolgt, verschwindet die Dispersion nicht wie gefordert in der Ausgangsebene.

Zusammen mit dem Monochromator wurde von Plies ein elektrostatisches Energiefilter vorgeschlagen, daß zwei Zylinderspiegelanalysatoren verwendet. Die optische Achse ist bei diesem System nicht mehr gerade, sondern weist die Form eines Omegas ohne Taillierung auf (Abbildung 3.2). Die Dispersion ist in der Symmetrieebene des Omegas am größten und verschwindet am Ausgang, so daß sich dieses System auch als Monochromator eignet. Bei einer Elektronenenergie von 3 kV ist bereits ein Abstand von 11 cm zwischen Eintritts- und Austrittsquellbild notwendig nur um die geforderte Mindestdispersion von $10 \mu\text{m}/\text{eV}$ zu erreichen. Die Ebenen von Eintritts- und Austrittsquellbild fallen wie beim Wien-Filter mit den Ein- und Ausgangsebenen des Systems zusammen (Abbildung 3.2). Das System weist fünf stigmatische Strahlcrossover auf.

3.1.3 Monochromator von Rose

Von Rose [16] wurde ebenfalls ein rein elektrostatischer Monochromator vorgeschlagen. Er besteht aus vier Kondensatoren aus je zwei konzentrisch angeordneten Halbkugeln. Die optische Achse wird in Form eines Omegas gekrümmt. Im Gegensatz zum Monochromator von Plies ist die Omegaform jedoch stark tailliert (Abbildung 3.3). Das System weist fünf stigmatische Strahlcrossover auf. Die Dispersion ist in der Omega-Symmetrieebene maximal und verschwindet in

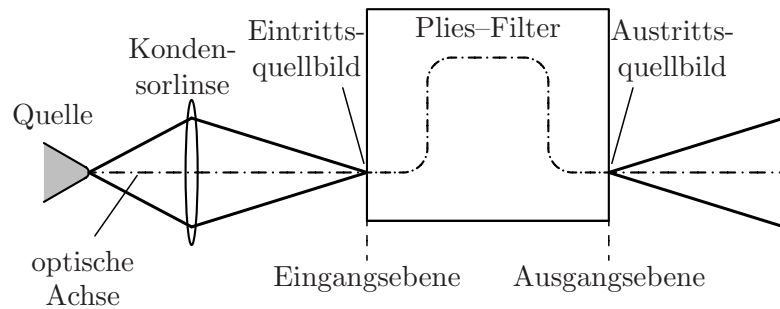


Abbildung 3.2: Plies-Filter als Monochromator.

der Ausgangsebene.

Das Eintritts- und das Austrittsqueillbild sind *virtuell*. Beide Bilder liegen in der Symmetrieebene des Omegas, so daß im Gegensatz zum Wien-Filter und dem Monochromator von Plies außer dem Abstand zwischen Quelle und Eintritts-queillbild keine effektive Verlängerung des Mikroskops durch den Monochromator mehr hinzukommt (Abbildung 3.3). Die Dispersion in der Symmetrieebene ist zudem mit $40 \mu\text{m}/\text{eV}$ bei einer Baulänge von nur 6 cm deutlich größer als bei den anderen Designs. Die Baulänge ist der Abstand zwischen der Eingangs- und der Ausgangsebene des Monochromators.

Bislang wurde das System nur unter Verwendung der Kastenfeldnäherung untersucht, bei der die realistischen Randfelder der Elemente vernachlässigt werden. Im Rahmen dieser Näherung berühren sich die entgegengesetzt geladenen Elektroden der Kugelkondensatorelemente. Dies erschwert die bautechnische Realisierung dieses Vorschlags beträchtlich. Zur Zeit wird von der Arbeitsgruppe von Professor Plies an der Universität Tübingen versucht, dieses System experimentell zu realisieren.

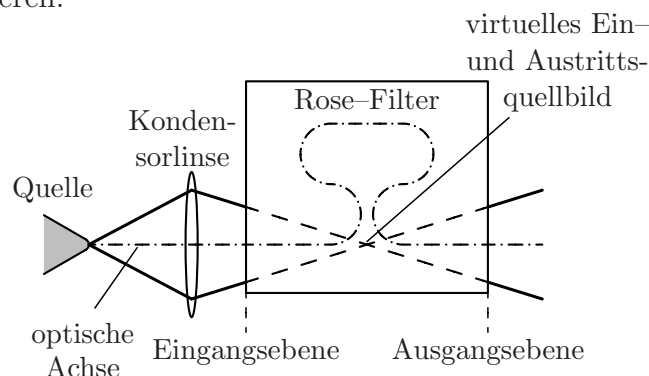


Abbildung 3.3: Rose-Filter als Monochromator.

3.2 Elektrostatischer Monochromator mit *astigmatischem* Strahlengang

Allen bisher diskutierten Designs gemeinsam sind *stigmatische* Zwischenbilder der Quelle im Strahlengang. Durch den Boersch-Effekt sind diese Designs daher im Strahlstrom auf einige 10 nA begrenzt, wenn der Richtstrahlwertverlust nicht zu groß sein soll.

Um diese Beschränkung zu überwinden, weist das in den folgenden Kapiteln vorgestellte Design ausschließlich astigmatische reelle Zwischenbilder der Quelle auf. Die Ein- und Austrittsbilder der Quelle sind virtuell. Da die Stromdichte in astigmatischen Zwischenbildern sehr viel niedriger ist als in stigmatischen, ist eine sehr viel kleinere Energieverbreiterung durch den Boersch-Effekt zu erwarten.

Darüber hinaus erfüllt es alle sonstigen Anforderungen wie verschwindende Ausgangsdispersion, hohe Dispersion in der Filterebene sowie verschwindender Abstand zwischen virtuellem Eintritts- und Austrittsquellbild. Die optische Achse verläuft wie im stigmatisch abbildenden Monochromator von Rose in Form eines Omegas. Die hierzu verwendeten elektrostatischen Sektorablenkelemente weisen genügend große Abstände voneinander auf, so daß das System bautechnisch weitaus weniger Probleme aufwirft, als das im vorherigen Abschnitt beschriebene System von Rose.

Die Randfelder wurden bei der Berechnung der Elektrodengeometrien mitberücksichtigt. Durch eine Monte-Carlo Simulation konnte außerdem die Reduzierung des Boersch-Effekts beim Übergang von stigmatischen zu astigmatischen Crossovern nachgewiesen werden.

Kapitel 4

Theoretische Grundlagen der Strahldynamik

In diesem Kapitel wird die Coulomb–Wechselwirkung innerhalb des Elektronenstrahls vernachlässigt. Ihr Einfluß wird in Kapitel 10 gesondert behandelt. Die Bahn jedes Elektrons wird dann allein durch die äußeren elektrischen und/oder magnetischen Felder der elektronenoptischen Elemente des Gerätes bestimmt. Im folgenden werden elektronenoptische Elemente mit zeitlich konstanten elektrischen und magnetischen Feldern vorausgesetzt. Somit kann nicht nur das elektrische, sondern auch das magnetische Feld im ladungs– und stromfreien Raum wegen

$$\operatorname{rot}\vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 \quad \text{und} \quad \operatorname{rot}\vec{E} = 0 \quad (4.1)$$

durch ein Skalarpotential ψ mit $\vec{B} = -\operatorname{grad}\psi$ beziehungsweise φ mit $\vec{E} = -\operatorname{grad}\varphi$ beschrieben werden.

Die Bahn eines Elektrons, das entlang der Symmetrieachse mit der Sollenergie E_0 aus der ideal justierten Quelle austritt, definiert die optische Achse des Gesamtsystems (Abbildung 4.1). Bei Vorhandensein von elektrischen und/oder magnetischen Dipolfeldern ist die optische Achse gekrümmt. Eine Fläche, die die Achse enthält, wird in der Elektronenoptik als *Schnitt* bezeichnet. Eine senkrecht zur Achse stehende Fläche heißt *Ebene*.

In elektronenoptischen Systemen liegt der Öffnungswinkel des Strahlbündels gewöhnlich in der Größenordnung von 1 mrad bis 10 mrad, der maximale Bündeldurchmesser übersteigt üblicherweise 100 μm nicht. Deshalb ist eine Entwicklung der Bewegungsgleichung der Elektronen um die optische Achse sinnvoll. Hierzu

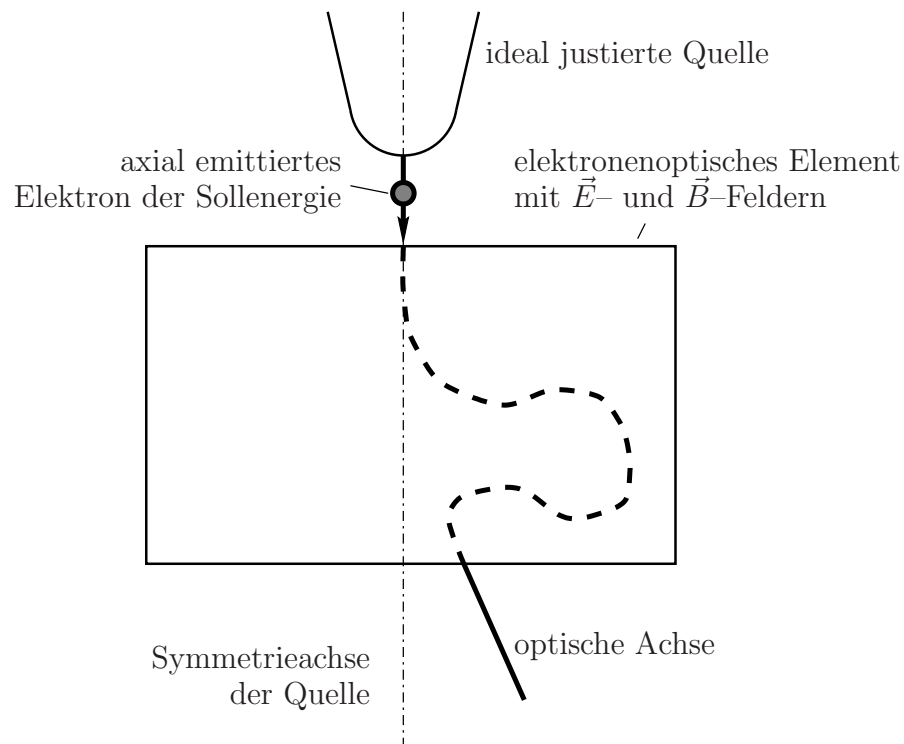


Abbildung 4.1: Definition der optischen Achse

bedarf es eines der Achse angepaßten krummlinigen orthogonalen Koordinatensystems.

4.1 Orthogonales Koordinatensystem um eine gekrümmte Achse

Die optische Achse eines beliebigen Systems sei gegeben durch die Raumkurve

$$\vec{R}(\tilde{z}) \in \mathbb{R}^3 \quad , \quad (4.2)$$

wobei \tilde{z} die Bogenlänge entlang der Achse bezeichnet. Die in jedem Punkt der Achse über

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{R}}{d\tilde{z}}(\tilde{z}) &= \vec{e}_t(\tilde{z}) \quad : \quad \text{Tangentenvektor} \\ \frac{d\vec{e}_t}{d\tilde{z}}(\tilde{z}) &= \kappa(\tilde{z})\vec{e}_n(\tilde{z}) \quad : \quad \text{Normalenvektor} \\ \vec{e}_t(\tilde{z}) \times \vec{e}_n(\tilde{z}) &= \vec{e}_b(\tilde{z}) \quad : \quad \text{Binormalenvektor}\end{aligned}\tag{4.3}$$

definierten, zueinander orthogonalen Einheitsvektoren $\vec{e}_t(\tilde{z})$, $\vec{e}_n(\tilde{z})$ und $\vec{e}_b(\tilde{z})$ bezeichnet man als Frenetsches Dreibein [45]. Hierbei bedeutet $\kappa(\tilde{z})$ die lokale Krümmung der Achse. Der Krümmungsradius ist durch $\varrho(\tilde{z}) := 1/\kappa(\tilde{z})$ gegeben. Üblicherweise wird $\kappa(\tilde{z})$ positiv gewählt, so daß der Normalenvektor \vec{e}_n stets zum lokalen Krümmungsmittelpunkt hin zeigt. Zwischen den Vektoren des Frenetschen Dreibeins gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{e}_t}{d\tilde{z}}(\tilde{z}) &= \kappa(\tilde{z})\vec{e}_n(\tilde{z}) , \\ \frac{d\vec{e}_n}{d\tilde{z}}(\tilde{z}) &= -\kappa(\tilde{z})\vec{e}_t(\tilde{z}) + \tau(\tilde{z})\vec{e}_b(\tilde{z}) , \\ \frac{d\vec{e}_b}{d\tilde{z}}(\tilde{z}) &= -\tau(\tilde{z})\vec{e}_n(\tilde{z}) .\end{aligned}\tag{4.4}$$

Die Torsion $\tau(\tilde{z})$ ist hierbei ein Maß für die Verwindung der Achse. Mit Hilfe des Frenetschen Dreibeins wird ein Raumpunkt

$$\vec{r}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) := \vec{R}(\tilde{z}) + \tilde{x}\vec{e}_n(\tilde{z}) + \tilde{y}\vec{e}_b(\tilde{z})\tag{4.5}$$

in unmittelbarer Nähe der Achse durch die Koordinaten $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ eindeutig beschrieben. Die Tangentenvektoren an die Koordinatenlinien

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{z}} = (1 - \tilde{x}\kappa)\vec{e}_t - \tilde{y}\tau\vec{e}_n + \tilde{x}\tau\vec{e}_b , \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{x}} = \vec{e}_n , \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{y}} = \vec{e}_b ,\tag{4.6}$$

sind jedoch wegen

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{x}} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{y}} = 0 \quad , \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{x}} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{z}} = -\tilde{y}\tau \quad , \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{y}} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial \tilde{z}} = \tilde{x}\tau \quad ,\tag{4.7}$$

nur für verschwindende Torsion τ orthogonal. Zur Konstruktion eines orthogonalen Koordinatensystems aus (4.5) verwendet man als Ansatz für einen beliebigen Raumpunkt

$$\vec{r}(x, y, z) := \vec{R}(z) + x\vec{e}_x(z) + y\vec{e}_y(z) \quad \text{mit} \quad z = \tilde{z}\tag{4.8}$$

mit den neuen gedrehten Basisvektoren

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_x \\ \vec{e}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\vartheta(\tilde{z})) & -\sin(\vartheta(\tilde{z})) \\ \sin(\vartheta(\tilde{z})) & \cos(\vartheta(\tilde{z})) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{e}_n \\ \vec{e}_b \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{e}_z := \vec{e}_t \quad . \quad (4.9)$$

Für die Funktion $\vartheta(\tilde{z})$ ergibt sich aus den Bedingungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{r}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial x_j} &= 0 \quad \text{für } i \neq j \quad , \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \\ x_1 &:= x \quad , \quad x_2 := y \quad , \quad x_3 := z \end{aligned} \quad (4.10)$$

für orthogonale Koordinatensysteme die Differentialgleichung

$$\frac{d\vartheta}{d\tilde{z}}(\tilde{z}) = \tau(\tilde{z}) \quad \text{und damit} \quad \vartheta(\tilde{z}) = \vartheta_0 + \int_0^{\tilde{z}} \tau(z) dz \quad . \quad (4.11)$$

Die Funktion $\vartheta(z)$ beschreibt also einen Drehwinkel, der gerade die durch die Torsion bedingte Verdrillung des Koordinatensystems (4.5) kompensiert. Für die Koordinatenableitungen des Ortsvektors, den metrischen Tensor g_{ij} sowie das Linienelement ds des orthogonalen Systems (4.8) erhält man

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial z} = (1 - \kappa \vec{\rho} \cdot \vec{e}_n) \vec{e}_z \quad , \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial x} = \vec{e}_x \quad , \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial y} = \vec{e}_y \quad , \quad (4.12)$$

$$g_{ij} := \frac{\partial \vec{r}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial x_j} \quad , \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad , \quad (4.13)$$

$$\mathbf{g} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (1 - \kappa \vec{\rho} \cdot \vec{e}_n)^2 \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{\rho} := x \vec{e}_x + y \vec{e}_y \quad , \quad (4.14)$$

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + (1 - \kappa \vec{\rho} \cdot \vec{e}_n)^2 dz^2 \quad . \quad (4.15)$$

Für die nachfolgenden Überlegungen ist der Übergang zur komplexen Schreibweise

$$\begin{aligned} w &:= x + iy \quad , \quad x = \frac{1}{2}(w + \bar{w}) \quad , \\ \bar{w} &:= x - iy \quad , \quad y = \frac{1}{2i}(w - \bar{w}) \quad , \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\Gamma := \kappa \exp(i\vartheta) \quad : \quad \text{komplexe Krümmung} \quad (4.17)$$

sinnvoll. Hieraus ergeben sich für die Umrechnung der partiellen Ableitungen die Beziehungen

$$\begin{aligned} \partial_w &= \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y) \quad , \quad \partial_x = \partial_w + \partial_{\bar{w}} \quad , \\ \partial_{\bar{w}} &= \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y) \quad , \quad \partial_y = i(\partial_w - \partial_{\bar{w}}) \quad , \end{aligned} \quad (4.18)$$

wobei die partielle Ableitung nach einem Parameter a durch den Operator

$$\partial_a := \frac{\partial}{\partial a} \quad (4.19)$$

abgekürzt ist. Für die metrischen Koeffizienten und das Linienelement erhält man in komplexer Notation

$$\begin{aligned} g_1 &:= \sqrt{g_{11}} = 1 \quad , \quad g_2 := \sqrt{g_{22}} = 1 \\ h = g_3 &:= \sqrt{g_{33}} = 1 - \operatorname{Re} \{ \Gamma \bar{w} \} = 1 - \kappa \vec{\rho} \cdot \vec{e}_n \\ ds^2 &= dw d\bar{w} + h^2 dz^2 \quad . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Der Realteil einer komplexen Größe F wird mit $\operatorname{Re} \{ F \}$ bezeichnet.

4.2 Multipolentwicklung der Skalarpotentiale

Zur Aufstellung der linearisierten Bewegungsgleichung der Elektronen im Koordinatensystem (4.8) benötigt man die Entwicklung des elektrostatischen Potentials φ und des magnetostatischen Potentials ψ in diesem System bezüglich der kleinen Abstände w und \bar{w} zur optischen Achse. Mit Hilfe der Beziehungen (4.16, 4.18, 4.20) vereinfacht sich der Laplace-Operator

$$\Delta \varphi = \frac{1}{g_1 g_2 g_3} \left\{ \partial_{x_1} \left(\frac{g_2 g_3}{g_1} \partial_{x_1} \varphi \right) + \partial_{x_2} \left(\frac{g_3 g_1}{g_2} \partial_{x_2} \varphi \right) + \partial_{x_3} \left(\frac{g_1 g_2}{g_3} \partial_{x_3} \varphi \right) \right\} \quad (4.21)$$

für beliebige orthogonale Koordinatensysteme [46] zu

$$\Delta \varphi = \frac{1}{h} \left\{ \partial_x (h \partial_x \varphi) + \partial_y (h \partial_y \varphi) + \partial_z \left(\frac{1}{h} \partial_z \varphi \right) \right\} \quad (4.22)$$

in reeller und zu

$$\Delta \varphi = \frac{1}{h} \left\{ 2 \partial_w (h \partial_{\bar{w}} \varphi) + 2 \partial_{\bar{w}} (h \partial_w \varphi) + \partial_z \left(\frac{1}{h} \partial_z \varphi \right) \right\} \quad (4.23)$$

in komplexer Darstellung. Im ladungsfreien Raum gelten die Laplace-Gleichungen

$$\Delta \varphi = 0 \quad \text{und} \quad \Delta \psi = 0 \quad (4.24)$$

für die beiden Potentiale. Die Lösung der Laplace-Gleichung (4.24) läßt sich für den Laplace-Operator (4.23) in eine Potenzreihe

$$\varphi(w, \bar{w}, z) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\infty} b_{\lambda\mu}(z) w^{\lambda} \bar{w}^{\mu} \quad (4.25)$$

entwickeln. Die unbekannten Entwicklungskoeffizienten $b_{\lambda\mu}(z)$ sind komplexwertige Funktionen von z . Da das Potential φ eine *reelle* Größe ist, müssen sie die Relation

$$\bar{b}_{\lambda\mu} = b_{\mu\lambda} \quad (4.26)$$

erfüllen. Setzt man den Ansatz (4.25) in den Laplace-Operator (4.23) ein, so erhält man für die Koeffizienten die Rekursionsformel

$$\begin{aligned} & 4(\lambda+1)(\mu+1)b_{\lambda+1,\mu+1} + b_{\lambda\mu}'' + \Gamma\bar{\Gamma}(\lambda+\mu+6\lambda\mu)b_{\lambda\mu} \\ & + \frac{1}{2}\Gamma'b_{\lambda,\mu-1}' - \frac{1}{2}\Gamma b_{\lambda,\mu-1}'' - \frac{1}{4}\bar{\Gamma}\Gamma^2(\mu-4\lambda-1+6\lambda\mu)b_{\lambda,\mu-1} \\ & + \frac{1}{2}\bar{\Gamma}'b_{\lambda-1,\mu}' - \frac{1}{2}\bar{\Gamma}b_{\lambda-1,\mu}'' - \frac{1}{4}\Gamma\bar{\Gamma}^2(\lambda-4\mu-1+6\lambda\mu)b_{\lambda-1,\mu} \\ & - \bar{\Gamma}(\mu+1)(6\lambda+1)b_{\lambda,\mu+1} - \Gamma(\lambda+1)(6\mu+1)b_{\lambda+1,\mu} \\ & + \bar{\Gamma}^2(\mu+1)(3\lambda-2)b_{\lambda-1,\mu+1} + \Gamma^2(\lambda+1)(3\mu-2)b_{\lambda+1,\mu-1} \\ & - \frac{1}{4}\bar{\Gamma}^3(\mu+1)(2\lambda-3)b_{\lambda-2,\mu+1} - \frac{1}{4}\Gamma^3(\lambda+1)(2\mu-3)b_{\lambda+1,\mu-2} \\ & = 0 \quad . \end{aligned} \quad (4.27)$$

Hierbei sind alle Koeffizienten mit negativem Index Null zu setzen. Ein Strich an einer Größe bedeutet deren Ableitung nach z . Falls die Koeffizientenfunktionen $b_{0\lambda} = \bar{b}_{\lambda 0}$ bekannt sind, können alle übrigen Koeffizienten mit Hilfe von (4.27) aus diesen bestimmt werden. Mit Hilfe der Beziehung (4.26) und der Ersetzung des Summationsindex μ durch $\nu = \mu - \lambda$ läßt sich die Reihendarstellung (4.25) umschreiben zu

$$\varphi = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} (w\bar{w})^\lambda \operatorname{Re} \{a_{\nu\lambda} \bar{w}^\nu\} \quad \text{mit} \quad (4.28)$$

$$a_{\nu\lambda} = (2 - \delta_{0\nu})b_{\lambda,\nu+\lambda} \quad . \quad (4.29)$$

Hierbei bedeutet δ_{ij} das Kronecker-Symbol. Setzt man für w die komplexe Polardarstellung $w = \rho \exp(i\phi)$ ein, so läßt sich das Potential auf die Form

$$\varphi = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \rho^{2\lambda} \sum_{\nu=0}^{\infty} \rho^\nu \operatorname{Re} \{a_{\nu\lambda} \exp(-i\nu\phi)\} \quad (4.30)$$

bringen. Der Wert des zu $a_{\nu\lambda}$ gehörenden Feldanteils weist eine ν -fache Periodizität bezüglich des Drehwinkels ϕ auf. Dies wird üblicherweise als ν -*zählig* bezeichnet. Vom Achsenabstand $\rho = |w|$ hängt der Feldanteil mit $(2\lambda + \nu)$ -facher Potenz ab. Die Koeffizienten

$$\Phi_\nu := a_{\nu 0} = (2 - \delta_{0\nu})b_{0,\nu} \quad (4.31)$$

werden *Multipolmomente ν -ter Ordnung* genannt. Das Potential entlang der Achse ist gegeben durch $\Phi := \Phi_0$, das Dipolmoment durch Φ_1 und so fort. Alle Koeffizienten der Feldanteile mit $\lambda > 0$ können mit Hilfe von (4.27) und (4.29) durch die Multipolmomente Φ_ν und ihre Ableitungen nach z ausgedrückt werden. Für die Entwicklung des elektrischen Potentials bis zur vierten Potenz im Achsabstand ρ , erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned} \varphi = \operatorname{Re} \left\{ \Phi + \Phi_1 \bar{w} + \Phi_2 \bar{w}^2 - \frac{1}{4} (\Phi'' - \Phi_1 \bar{\Gamma}) w \bar{w} + \Phi_3 \bar{w}^3 \right. \\ + \frac{1}{8} \left(2\Phi_2 \bar{\Gamma} - \Phi_1'' + \frac{3}{2} \operatorname{Re} \{ \bar{\Gamma} \Phi_1 \} \Gamma - \frac{5}{2} \Phi'' \Gamma - \Phi' \Gamma' \right) w \bar{w}^2 \\ + \frac{1}{4} \left(\Phi_3 \bar{\Gamma} - \frac{1}{3} \Phi_2'' + \frac{5}{12} \Phi_2 \Gamma \bar{\Gamma} - \frac{3}{8} \Phi_1'' \Gamma - \frac{1}{6} \Phi_1' \Gamma' \right. \\ \left. \left. + \frac{5}{16} \operatorname{Re} \{ \bar{\Gamma} \Phi_1 \} \Gamma^2 - \frac{11}{16} \Phi'' \Gamma^2 - \frac{13}{24} \Phi' \Gamma \Gamma' \right) w \bar{w}^3 \right. \\ \left. + \frac{1}{64} \left(6\Phi_2 \bar{\Gamma}^2 - 6\Phi_1'' \bar{\Gamma} - 4\Phi_1' \bar{\Gamma}' - \Phi_1 \bar{\Gamma}'' + \frac{9}{2} \Phi_1 \Gamma \bar{\Gamma}^2 + \Phi^{[4]} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{19}{2} \Phi'' \Gamma \bar{\Gamma} - 7\Phi' \bar{\Gamma}' \Gamma \right) w^2 \bar{w}^2 + \Phi_4 \bar{w}^4 + \dots \right\} . \end{aligned} \quad (4.32)$$

Hierbei bezeichnet $\Phi^{[n]}$ die n -te Ableitung von Φ nach z . Die entsprechende Darstellung für das skalare magnetische Potential ψ ergibt sich durch die Substitutionen $\varphi \rightarrow \psi$ und $\Phi_\nu \rightarrow \Psi_\nu$ in dieser Reihe.

Das in der Elektrodynamik übliche Vektorpotential \vec{A} und das skalare magnetische Potential ψ sind über

$$\vec{B} = -\operatorname{grad} \psi = \operatorname{rot} \vec{A} \quad (4.33)$$

verknüpft. Mit Hilfe der Rotation

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{A} = \sum_{\eta=1}^3 \vec{e}_\eta \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 \varepsilon_{\eta\mu\nu} \frac{1}{g_\mu g_\nu} \partial_\mu (A_\nu g_\nu) \\ \text{mit } g_\nu := \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial x_\nu} \right| \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\text{und } \varepsilon_{\eta\mu\nu} = \begin{cases} 1 & : \text{ für } \eta\mu\nu \text{ zyklisch} \\ -1 & : \text{ für } \eta\mu\nu \text{ antizyklisch} \\ 0 & : \text{ für Fälle mit übereinstimmenden Indizes} \end{cases}$$

und dem Gradienten

$$\operatorname{grad} \psi = \sum_{\eta=1}^3 \vec{e}_\eta \frac{1}{g_\eta} \partial_{x_\eta} \psi \quad (4.35)$$

in krummlinigen orthogonalen Koordinatensystemen [46] und der komplexen Notation

$$A := A_x + iA_y \quad (4.36)$$

für die laterale Komponente des Vektorpotentials, ergibt sich unter Beachtung von (4.16) bis (4.20) für die Beziehung $-\text{grad}\psi = \text{rot}\vec{A}$ zwischen magnetischem Skalar- und Vektorpotential in komplexer Schreibweise

$$\begin{aligned} 2ih\partial_{\bar{w}}\psi &= \partial_z A - 2\partial_{\bar{w}}(A_z h) \quad , \\ (\partial_{\bar{w}}\bar{A} - \partial_w A) &= \frac{i}{h} \frac{\partial\psi}{\partial z} \quad . \end{aligned} \quad (4.37)$$

Das Vektorpotential ist durch die Gleichungen (4.37) nicht eindeutig bestimmt. Aufgrund der Beziehung $\text{rot}(\text{grad}\chi) = 0$ kann es durch Addition des Gradienten eines beliebigen skalaren Feldes χ

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \text{grad}\chi \quad (4.38)$$

umgeechtet werden. Es gibt daher beliebig viele Möglichkeiten, aus der Reihenentwicklung (4.32) des Skalarpotentials eine Reihenentwicklung für das Vektorpotential zu konstruieren. Das in [49] verwendete Konstruktionsverfahren erscheint hierbei am einfachsten.

4.3 Bewegungsgleichung des Elektrons

Die Wellenfunktion ψ eines einzelnen Elektrons mit relativistischer Geschwindigkeit wird, solange man quantenelektrodynamische Effekte wie Wechselwirkung mit dem eigenen elektromagnetischen Feld vernachlässigt, durch die Dirac-Gleichung [47] beschrieben. Im Falle der Elektronenoptik sind Spineffekte der Elektronen durch Kopplung an die äußeren, langsam veränderlichen elektromagnetischen Felder der elektronenoptischen Elemente vernachlässigbar klein. Ebenso können Quanteneffekte vernachlässigt werden. Daher wird das Elektron hier als klassisches relativistisches Teilchen ohne innere Freiheitsgrade betrachtet. Für seine Lagrange-Funktion [48] erhält man

$$L := -m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - (-e) \left(\varphi(\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r})\vec{v} \right) \quad . \quad (4.39)$$

Hierbei bezeichnet \vec{v} die Geschwindigkeit des Elektrons. Der Betrag der elektrischen Elementarladung wird mit e bezeichnet.

Nach dem Hamiltonschen Prinzip erfolgt die Bewegung eines Teilchens zwischen zwei Punkten $\vec{r}_0 = \vec{r}(t_0)$ und $\vec{r}_1 = \vec{r}(t_1)$ entlang derjenigen Bahn $\vec{r}(t) = \vec{R}(t)$, die das Funktional

$$w[\vec{r}(t), \vec{v}(t), t] := \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{r}(t), \vec{v}(t), t) dt \quad (4.40)$$

extremalisiert. Die Funktion

$$W(\vec{r}_0, \vec{r}_1) := \text{Extr.} \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{r}, \vec{v}, t) dt \quad (4.41)$$

wird Wirkungskfunktion genannt. Die Lösung des Extremwertproblems ist äquivalent zur Lösung der Euler–Lagrangeschen Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad , \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad . \quad (4.42)$$

Im Falle der Lagrange–Funktion (4.39) erhält man gerade die Lorentzsche Bewegungsgleichung

$$\frac{d(m(v)\vec{v})}{dt} = -e \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad , \quad m(v) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad , \quad \vec{E} = -\vec{\nabla} \varphi \quad (4.43)$$

für klassische relativistische Teilchen mit der Ladung $-e$. Für den kanonische Impuls \vec{p} ergibt sich

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial v_i} \quad \Rightarrow \quad \vec{p} = \vec{p}_{kin} - e\vec{A} \quad , \quad \vec{p}_{kin} := m(v)\vec{v} \quad . \quad (4.44)$$

Da die Lagrange–Funktion (4.39) nicht explizit von der Zeit abhängt, ist

$$\begin{aligned} H &:= \vec{p} \cdot \vec{v} - L \\ &= m(v)c^2 + V = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + (-e)\varphi \end{aligned} \quad (4.45)$$

eine Erhaltungsgröße [50]. Trotz geschwindigkeitsabhängigem Potential ist H identisch mit der Gesamtenergie E des Teilchens. Schreibt man den Ausdruck als Funktion der Variablen (\vec{r}, \vec{p}) , so erhält man die Hamiltonfunktion

$$H = H(\vec{r}, \vec{p}) = \sqrt{(\vec{p} + e\vec{A})^2 c^2 + m_0^2 c^4} - e\varphi = E = \text{const.} \quad . \quad (4.46)$$

Dies ist identisch mit der relativistischen Energie–Impulsbeziehung

$$E_{kin}^2 = (E - V)^2 = (p_{kin}c)^2 + (m_0 c^2)^2 \quad . \quad (4.47)$$

Es ist sinnvoll, das Potential so zu eichen, daß das Elektron bei $\varphi = 0$ ruht. Dann ist die Gesamtenergie

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - e\varphi = m_0 c^2 = E_{Ruhe} \quad (4.48)$$

gerade gleich der Ruheenergie E_{Ruhe} des Elektrons. Aus (4.48) erhält man

$$p_{kin} = m(v)v = \sqrt{2em_0\varphi^*} \quad \text{mit} \quad \varphi^* = \varphi \left(1 + \frac{e\varphi}{2E_{Ruhe}}\right) \quad . \quad (4.49)$$

Hierbei wird φ^* als relativistisch korrigiertes Potential bezeichnet, da man im nichtrelativistischen Grenzfall $\varphi^* = \varphi$ erhält. Der kanonische Impuls ergibt sich hiermit zu

$$\vec{p} = \sqrt{2em_0\varphi^*} \vec{e}_v - e\vec{A} \quad . \quad (4.50)$$

Der Einheitsvektor $\vec{e}_v := d\vec{r}/ds$ zeigt tangential zur Bahn in Richtung der Teilchengeschwindigkeit.

Eine gegebene Lagrange-Funktion kann man durch Hinzuzugabe einer beliebigen Funktion umeichen, ohne die Lösung des Hamiltonschen Extremalproblems zu verändern, da

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left(L + \frac{df}{dt} \right) dt = \delta \int_{t_0}^{t_1} L dt + \underbrace{\delta(f(t_1) - f(t_0))}_{=0} = \delta \int_{t_0}^{t_1} L dt \quad (4.51)$$

gilt. Aufgrund der Energieerhaltung (4.46) kann die Gesamtenergie als totale Zeitableitung

$$\frac{d}{dt}(E(t - t_0)) = E = H \quad (4.52)$$

geschrieben werden. Als modifizierte Lagrangefunktion erhält man

$$\tilde{L} = L + H = \vec{p}\vec{v} \quad . \quad (4.53)$$

Die verkürzte Wirkungsfunktion ist durch

$$S := \text{Extr.} \int_{t_0}^{t_1} \tilde{L} dt = \text{Extr.} \int_{t_0}^{t_1} \vec{p}\vec{v} dt = \text{Extr.} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_1} \vec{p} d\vec{r} \quad (4.54)$$

definiert. Mit Hilfe von

$$n := \frac{\vec{p}}{m_0 c} \frac{d\vec{r}}{ds} = \left(\sqrt{\frac{2e}{E_{Ruhe}}} \varphi^* \vec{e}_v - \frac{e}{m_0 c} \vec{A} \right) \vec{e}_v = \sqrt{\frac{2e}{E_{Ruhe}}} \varphi^* - \frac{e}{m_0 c} \vec{A} \vec{e}_v \quad (4.55)$$

erhält man für die verkürzte Wirkungsfunktion die Darstellung

$$\frac{S}{m_0 c} = \text{Extr.} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_1} \frac{\vec{p}}{m_0 c} d\vec{r} = \text{Extr.} \int_{s_0}^{s_1} n ds \quad , \quad (4.56)$$

wobei s die Bogenlänge entlang einer beliebig gewählten Bahn zwischen \vec{r}_0 und \vec{r}_1 bezeichnet. Die Funktion n ist das elektronenoptische Analogon zum Brechungsindex in der Lichtoptik. Der Brechungsindex eines Mediums ist dort durch den Quotienten

$$n(\vec{r}) := \frac{c}{c_p(\vec{r})} \quad (4.57)$$

von Vakuumlichtgeschwindigkeit c und Ausbreitungsgeschwindigkeit $c_p(\vec{r})$ des Lichtes im optischen Medium definiert. Überträgt man diese Definition auf die Elektronenoptik, so erhält man unter Beachtung der De-Broglie Beziehungen zwischen Teilchen- und Wellenbild

$$E = E_{kin} = h\nu \quad , \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad , \quad c_p = \lambda \nu \quad (4.58)$$

und der Definition der Teilchenwellenlänge λ

$$\vec{p} \vec{e}_v = \hbar \vec{k} \vec{e}_v = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{\vec{k} \vec{e}_v} \quad (4.59)$$

für den Brechungsindex den Ausdruck

$$n = \frac{c}{\lambda \nu} = c \frac{\vec{p} \vec{e}_v}{h\nu} = \frac{\vec{p} \vec{e}_v}{m_0 c} \quad , \quad (4.60)$$

welcher mit (4.55) identisch ist. Die auf den ersten Blick ungewohnte Definition (4.59) rührt daher, daß bei Anwesenheit eines Magnetfeldes die Trajektorien der Teilchenbahnen nicht mehr senkrecht auf den Flächen $S = \text{const.}$ konstanter Wellenphase stehen, da

$$\vec{\nabla} S = \vec{p} = m(v) \vec{v} - e \vec{A} \nparallel \vec{v} \quad (4.61)$$

gilt. Hierdurch ist der kürzeste Abstand $2\pi/k$ zwischen zwei Wellenflächen gleicher Phase für $\vec{A} \neq 0$ keine Strecke entlang einer Teilchentrajektorie mehr [51]. Es ist jedoch sinnvoller, die Wellenlänge wie in der Lichtoptik als Abstand von zwei Wellenflächen gleicher Phase *entlang* einer Teilchentrajektorie zu messen, wobei sich der Ausdruck (4.59) anstelle von $\lambda = 2\pi/k$ ergibt. Das Extremalprinzip (4.56) ist das elektronenoptische Äquivalent zum Fermatschen Prinzip der Lichtoptik, gemäß dem das Licht genau den Weg zwischen zwei Punkten nimmt, der den optischen Weg zwischen diesen Punkten extremalisiert.

Die Trajektorie des Referenzelektrons, die die optische Achse des Systems definiert, ist im krummlinigen orthogonalen Koordinatensystem (4.8) durch $\vec{r}(0, 0, z)$ gegeben. In diesem Koordinatensystem hat das Wirkungsintegral (4.56) die Form

$$\frac{S}{m_0 c} = \text{Extr.} \int_{z_0}^{z_1} \mu(z) dz \quad \text{mit} \quad \mu = n \frac{ds}{dz} \quad . \quad (4.62)$$

Mit Hilfe der sich aus (4.20) ergebenden Beziehung

$$ds = \sqrt{w' \bar{w}' + h^2} dz \quad , \quad h = 1 - \text{Re} \{ \Gamma \bar{w} \} \quad (4.63)$$

sowie der totalen Ableitung

$$\frac{d\vec{r}}{dz} \stackrel{(4.12)}{=} \vec{e}_v \frac{ds}{dz} = h \vec{e}_z + x' \vec{e}_x + y' \vec{e}_y \quad (4.64)$$

des Ortsvektors $\vec{r} = \vec{r}(x(z), y(z), z)$ erhält man für den reellwertigen Integranden des Wirkungsintegrals

$$\begin{aligned} \mu &= \sqrt{\frac{2e}{m_0 c^2} \varphi^* (h^2 + w' \bar{w}') - \frac{e}{m_0 c} \{ h A_z + \text{Re} \{ \bar{A} w' \} \}} \\ &= \sqrt{4\epsilon \varphi^* (h^2 + w' \bar{w}') - 2c\epsilon \{ h A_z + \text{Re} \{ \bar{A} w' \} \}} \quad . \end{aligned} \quad (4.65)$$

Hierbei wurde die Abkürzung

$$\epsilon := \frac{e}{2m_0 c^2} \quad (4.66)$$

verwendet.

Die Lösungen des Extremwertproblems (4.62) genügen der komplexen Euler–Lagrangeschen Differentialgleichung

$$\frac{d}{dz} \frac{\partial \mu}{\partial w'} - \frac{\partial \mu}{\partial \bar{w}} = 0 \quad (4.67)$$

in den komplexen Variablen $w = x + iy$ und $\bar{w} = x - iy$. Die zur komplexen Variablen w korrespondierende Euler–Lagrange Gleichung ist gerade die zu (4.67) komplex konjugierte Gleichung. Der Real– und der Imaginärteil von (4.67) liefert ein System aus zwei gekoppelten Differentialgleichungen für die unabhängigen reellen Bahnkoordinaten $x(z)$ und $y(z)$. Diese Differentialgleichungen sind ihm Rahmen der klassischen relativistischen Mechanik *exakt*.

Mit Hilfe der Beziehungen (4.37) erhält man für die komplexe Bewegungsgleichung (4.67)

$$\begin{aligned}
w'' = & \frac{w'^2}{2h^2 + w'\bar{w}'} \bar{w}'' + \frac{2(h^2 + w'\bar{w}')^2}{2h^2 + w'\bar{w}'} \frac{1}{\varphi^*} \partial_{\bar{w}} \varphi^* - \frac{(h^2 + w'\bar{w}')}{2h^2 + w'\bar{w}'} \frac{w'}{\varphi^*} \frac{d\varphi^*}{dz} \\
& + \frac{2hh'w'}{2h^2 + w'\bar{w}'} - \frac{2(h^2 + w'\bar{w}')}{2h^2 + w'\bar{w}'} \Gamma h \\
& - \frac{2(h^2 + w'\bar{w}')^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\epsilon\varphi^*}(2h^2 + w'\bar{w}')} \frac{\epsilon ci}{h} (w' \partial_z \psi - 2h^2 \partial_{\bar{w}} \psi) \quad .
\end{aligned} \tag{4.68}$$

Diese Differentialgleichung enthält sowohl w'' als auch \bar{w}'' . Für die Entwicklung der Lösung in eine Potenzreihe ist jedoch eine Form der Differentialgleichung sinnvoll, in der nur w'' vorkommt. Zu diesem Zweck ersetzt man \bar{w}'' mit Hilfe der konjugiert komplexen Gleichung von (4.68). Man erhält für die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
w'' &= \tilde{f}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', z) \\
&= \frac{h^2 + w'\bar{w}'}{\varphi^*} \left(\partial_{\bar{w}} - \frac{w'}{2h^2} \partial_z \right) \varphi^* - \frac{w'}{h} (\text{Re}\{\Gamma' \bar{w}\} + 2\text{Re}\{\Gamma \bar{w}'\}) - h\Gamma \\
&\quad - \frac{ic}{h} \sqrt{h^2 + w'\bar{w}'} \sqrt{\frac{\epsilon}{\varphi^*}} (w' \partial_z + w'^2 \partial_w - (2h^2 + w'\bar{w}') \partial_{\bar{w}}) \psi \quad .
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Sie gilt für beliebige krummlinige orthogonale Koordinatensysteme, ist relativistisch korrekt und berücksichtigt sowohl elektrische als auch magnetische Felder. Die Energie der Elektronen ist dabei durch das vorgegebene Potential φ^* festgelegt. Die Bewegungsgleichung für ein Elektron mit einer um den Betrag ΔE von der Sollenergie E_0 abweichenden Energie erhält man aus (4.69) durch die Substitution

$$\varphi \rightarrow \varphi + \kappa U \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{\Delta U}{U} = \frac{\Delta E}{E_0} \quad . \tag{4.70}$$

Hierbei haben die Elektronen, die in der Eintrittsebene z_i mit der Sollenergie E_0 entlang der Achse fliegen, genau die Beschleunigungsspannung

$$U = \Phi(z_i) = \varphi(w = 0, \bar{w} = 0, z_i) \tag{4.71}$$

durchlaufen. Die Größe κ beschreibt die relative Energieabweichung eines Elektrons von der Sollenergie.

4.4 Potenzreihenentwicklung

4.4.1 Linearisierte Bewegungsgleichung

Für die folgenden Überlegungen wird die Kompaktschreibweise

$$g[w, \dots] := g(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \dots) \quad (4.72)$$

für beliebige von w, \bar{w}, w', \bar{w}' abhängige Funktionen verwendet. Führt man die Substitution (4.70)

$$\tilde{f}[w, z] \xrightarrow{\varphi \rightarrow \varphi + \kappa U} f[w, \kappa, z] \quad (4.73)$$

in der rechten Seite der exakten Bewegungsgleichung (4.69) durch und entwickelt das Ergebnis f in eine Potenzreihe

$$f[w, \kappa, z] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\partial_{\beta}^n f[\beta w, \beta \kappa, z])|_{\beta=0} \quad (4.74)$$

in den betragsmäßig kleinen Größen w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ , so erhält man mit Hilfe der Multipolentwicklung der Potentiale (4.32) die taylorentwickelte Bahngleichung

$$L[w, z] = \sigma[w, \kappa, z] = \sum_{r=0}^{\infty} \sigma^{(r)}[w, \kappa, z] \quad . \quad (4.75)$$

Der in w, \bar{w}, w', w'' lineare Anteil ist durch

$$\begin{aligned} L[w, z] &= (\partial_{\beta} f[\beta w, 0, z])|_{\beta=0} \\ &= w'' + \frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi' + i v_0 \Psi') w' \\ &\quad + \frac{\Lambda}{4\Phi^*} \left\{ (\Phi'' + i v_0 \Psi'') + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{2\Phi^* \Lambda} + \text{Re} \left\{ \bar{\Gamma} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) \right\} \right\} w \\ &\quad - \frac{\Lambda}{\Phi^*} \left\{ (\Phi_2 + i v_0 \Psi_2) - \frac{\Phi_1^2}{8\Phi^* \Lambda} - \frac{\Gamma}{4} (2\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) \right\} \bar{w} \\ &\quad - \text{Re} \left\{ \left(\Gamma + \frac{\Lambda}{2\Phi^*} \Phi_1 \right) \bar{w} \right\} \left(\Gamma - \frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) \right) \end{aligned} \quad (4.76)$$

gegeben. Hierbei werden die Abkürzungen

$$\Phi^* = \Phi + \epsilon \Phi^2, \quad \Lambda = 1 + 2\epsilon \Phi \quad (4.77)$$

verwendet. Die Größe

$$v_0(z) = \frac{\sqrt{\frac{2e}{m_0} \Phi^*}}{\Lambda} = \frac{2c}{\Lambda} \sqrt{\epsilon \Phi^*} \quad (4.78)$$

ist die Geschwindigkeit eines Elektrons der Sollenergie auf der Achse.

Die Potenzreihe in w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ

$$\begin{aligned} \sigma[w, \kappa, z] &= \sum_{r=0}^{\infty} \sigma^{(r)}[w, \kappa, z] \\ &= \left\{ \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} (\partial_{\beta}^r f[\beta w, \beta \kappa, z]) \right\} \Big|_{\beta=0} - L[w, z] \quad , \end{aligned} \quad (4.79)$$

enthält aufgrund der Subtraktion von $L[w, z]$ nur noch linearen Terme in κ . Alle Entwicklungsglieder r -ter Potenz in w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ sind im Term $\sigma^{(r)}[w, \kappa, z]$ zusammengefasst.

Stimmt die Achse des Systems mit der Bahn eines Referenzelektrons der Sollenergie überein, muß $w'' = w' = \bar{w}' = w = \bar{w} = 0$ Lösung der Bahngleichung (4.75) für $\kappa = 0$ sein. Da dies in der entwickelten Bahngleichung für alle Potenzen größer oder gleich Eins in $w'', w', \bar{w}', w, \bar{w}$ und κ trivialerweise erfüllt ist, ist diese Forderung gleichbedeutend mit dem Verschwinden der nullten Ordnung

$$\sigma^{(0)} = \frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0\Psi_1) - \Gamma = 0 \quad (4.80)$$

von $\sigma[w, \kappa, z]$. Die Krümmung der Achse wird somit allein durch die elektrischen und magnetischen Dipolmomente bestimmt.

Multipliziert man beide Seiten der Taylorentwickelten Bahngleichung (4.75) mit der Potenzreihe $\sum_{r=0}^{\infty} \zeta^{(r)}$ einer beliebigen Funktion in w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ durch, so kommen zusätzliche lineare Glieder $\sigma^{(0)}\zeta^{(1)}$ zu $L[w, z]$ hinzu. Verschwindet die nullte Ordnung $\sigma^{(0)}$ nicht, so ist die als paraxiale Bahngleichung bezeichnete linearisierte Bewegungsgleichung $L[w, z] = 0$ nicht mehr eindeutig bestimmt.

Eine ebenfalls häufig verwendete Methode zur Herleitung der paraxialen Bahngleichung entwickelt zuerst μ in eine Taylorreihe und wendet danach erst den Euleroperator auf die Taylorentwicklung von μ an. Bei diesem Verfahren erhält man einen linearen Anteil, bei dem die letzte Zeile von (4.76) fehlt. Diese Zeile – und damit auch die Unterschiede in den paraxialen Bahngleichungen beider Methoden – verschwindet genau dann, wenn die Achse mit einer Elektronenbahn übereinstimmt.

Um solche Mehrdeutigkeiten bei der paraxialen Bahngleichung zu vermeiden, wird im folgenden eine Elektronenbahn als Achse vorausgesetzt und die komplexe Krümmung Γ mit Hilfe von (4.80) durch die Dipolmomente ersetzt. Für die

paraxiale Bahngleichung $L[w, z] = 0$ erhält man in diesem Fall

$$\begin{aligned}
 L[w, z] &:= w'' + \frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi' + iv_0\Psi') w' \\
 &+ \frac{\Lambda}{4\Phi^*} \left\{ (\Phi'' + iv_0\Psi'') + \frac{\Phi_1\bar{\Phi}_1}{2\Phi^*\Lambda} + \frac{\Lambda}{2\Phi^*} |\Phi_1 + iv_0\Psi_1|^2 \right\} w \\
 &+ \left\{ \frac{\Lambda^2}{32\Phi^{*2}} (3\Phi_1 + 2iv_0\Psi_1)^2 + \frac{4 - \Lambda^2}{32} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^{*2}} - \frac{\Lambda}{\Phi^*} (\Phi_2 + iv_0\Psi_2) \right\} \bar{w} \\
 &= 0 \quad .
 \end{aligned} \tag{4.81}$$

4.4.2 Paraxiale Abbildung und Fundamentalbahnen

Der Real- und der Imaginärteil der komplexen linearen homogenen Differentialgleichung (4.81) bilden ein System aus zwei reellwertigen, im allgemeinen Falle gekoppelten, linearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Daher existieren vier linear unabhängige Lösungen $w_\alpha, w_\beta, w_\gamma, w_\delta$, die den gesamten Lösungsraum

$$w^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = \alpha w_\alpha + \beta w_\beta + \gamma w_\gamma + \delta w_\delta \tag{4.82}$$

aufspannen. Diese *komplexwertigen* Lösungsfunktionen $w_\alpha, w_\beta, w_\gamma, w_\delta$ werden oft auch als Fundamentalbahnen des Systems bezeichnet. Die *reellen* Konstanten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ legen den Anfangsort- und die Anfangssteigung der Bahn in der Startebene z_i fest. Häufig wird ein spezieller Satz von Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned}
 w_{\alpha i} &:= w_\alpha(z_i) = 0, & w'_{\alpha i} &:= w'_\alpha(z_i) = 1 \quad , \\
 w_{\beta i} &:= w_\beta(z_i) = 0, & w'_{\beta i} &:= w'_\beta(z_i) = i \quad , \\
 w_{\gamma i} &:= w_\gamma(z_i) = 1, & w'_{\gamma i} &:= w'_\gamma(z_i) = c_\gamma \quad , \\
 w_{\delta i} &:= w_\delta(z_i) = i, & w'_{\delta i} &:= w'_\delta(z_i) = ic_\delta \quad ,
 \end{aligned} \tag{4.83}$$

für die Fundamentalbahnen in der Startebene z_i des Systems gewählt. Für die folgenden Überlegungen wird dieser Satz von Fundamentalbahn verwendet.

Üblicherweise werden die Bahnen w_α und w_β axiale Bahnen, die Bahnen w_γ und w_δ Feldbahnen genannt. Die Anfangssteigungen c_γ und c_δ der Feldbahnen werden ebenfalls häufig zu Null gewählt. Da es jedoch manchmal sinnvoll ist, hierfür von Null verschiedene Werte zu wählen, werden die Werte der Feldbahnsteigungen nicht festgelegt. In denjenigen Ebenen z_{bc} , in denen $w_\alpha(z_{bc}) = 0$ gilt, werden alle Strahlen, die von einem bestimmten Punkt $w_0 = \gamma + i\delta$ der Ebene z_i aus starten, zu einer Linie fokussiert (Abbildung 4.2). Der Mittelpunkt des Linienfokus liegt hierbei an der Position $\gamma w_\gamma(z_{bc}) + \delta w_\delta(z_{bc})$. Seine Winkelerorientierung

ist gleich dem Azimuth der w_β -Bahn in der Ebene z_{bc} . Analog hierzu entsteht in allen Ebenen z_{bs} , in denen die w_β -Bahn verschwindet, ein Linienfokus mit einer dem Azimuth der w_α -Bahn gleichen Winkelerorientierung. Falls die Fokusebenen

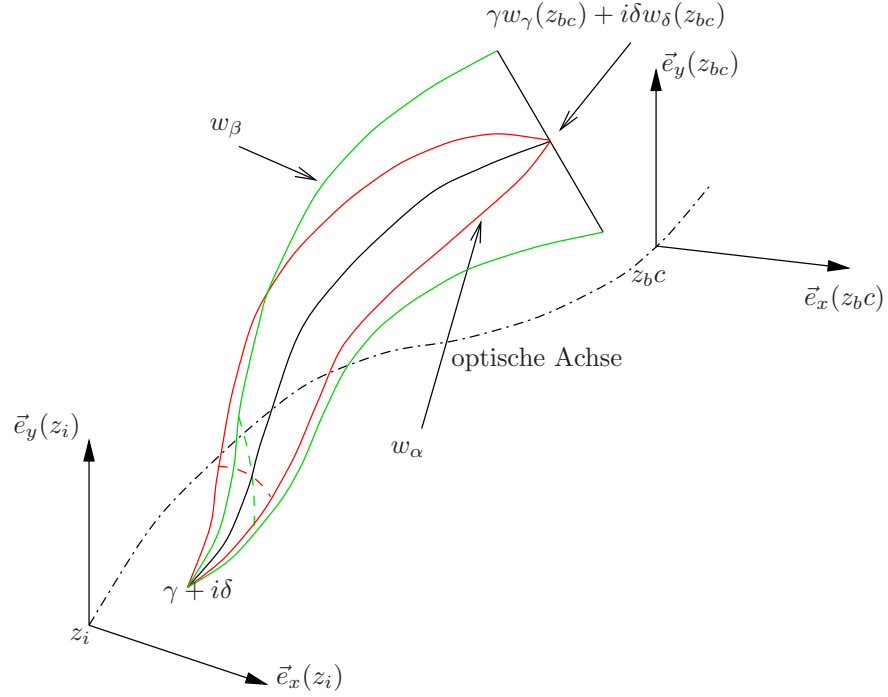


Abbildung 4.2: Astigmatische Abbildung

von w_α und w_β zusammenfallen ($z_b = z_{bc} = z_{bs}$) erhält man den Spezialfall der *stigmatischen* Abbildung. Alle von einem Punkt $\gamma + i\delta$ in der Ausgangsebene z_i ausgehenden Bahnen laufen wieder im Bildpunkt $\gamma w_\gamma(z_b) + i\delta w_\delta(z_b)$ in der Bildebene z_b zusammen.

4.4.3 Helmholtz–Lagrange Sätze

Mit Hilfe der Variablensubstitution

$$u = \sqrt[4]{\Phi^*} e^{-i\chi} w \quad \text{mit} \quad \chi(z) = - \int_{z_i}^z \frac{\Lambda v_0}{4\Phi^*} \Psi' dz = \sqrt{\frac{e}{8m_o}} \int_{z_i}^z \frac{B}{\sqrt{\Phi^*}} dz \quad (4.84)$$

geht (4.81) über in

$$u'' + \frac{1}{8\Phi^{*2}} \left\{ \Phi_1 \bar{\Phi}_1 + \frac{\Lambda^2 + 2}{2} \Phi'^2 + \Lambda^2 v_0^2 \Psi'^2 + \Lambda^2 |\Phi_1 + i v_0 \Psi_1|^2 \right\} u \\ + \left\{ \frac{\Lambda^2}{32\Phi^{*2}} (3\Phi_1 + 2i v_0 \Psi_1)^2 + \frac{4 - \Lambda^2}{32} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^{*2}} - \frac{\Lambda}{\Phi^*} (\Phi_2 + i v_0 \Psi_2) \right\} \bar{u} e^{-2i\chi} = 0 \quad . \quad (4.85)$$

Durch die Drehung $\exp(-i\chi)$ wird gerade die Larmordrehung der Elektronen durch das Magnetfeld $B(z) = -\Psi'(z)$ auf der Achse kompensiert. Die neue Differentialgleichung ist von der Struktur

$$u'' + T u - G \bar{u} = 0 \quad (4.86)$$

mit *reellem* Vorfaktor T . Außerdem kommt die erste Ableitung von u nicht mehr vor. Zwei beliebige voneinander linear unabhängige Lösungen u_μ und u_ν erfüllen die Gleichungen

$$u_\mu'' + T u_\mu = G \bar{u}_\mu \quad , \quad (4.87)$$

$$\bar{u}_\nu'' + T \bar{u}_\nu = \bar{G} u_\nu \quad . \quad (4.88)$$

Die zweite Gleichung ist dabei die zu (4.86) konjugiert komplexe Differentialgleichung. Multipliziert man die erste Gleichung mit \bar{u}_ν , die zweite mit $-u_\mu$ und addiert beide, so erhält man

$$u_\mu'' \bar{u}_\nu - \bar{u}_\nu'' u_\mu = G \bar{u}_\mu \bar{u}_\nu - \bar{G} u_\mu u_\nu = 2i \operatorname{Im} \{ G \bar{u}_\mu \bar{u}_\nu \} \quad . \quad (4.89)$$

Der Imaginärteil einer komplexen Größe F wird hierbei mit $\operatorname{Im}\{F\}$ bezeichnet. Bildet man den Realteil von (4.89) und beachtet, daß sich die linke Seite als totales Differential

$$u_\mu'' \bar{u}_\nu - \bar{u}_\nu'' u_\mu = \frac{d}{dz} (u_\mu' \bar{u}_\nu - \bar{u}_\nu' u_\mu) \quad (4.90)$$

schreiben läßt, ergibt sich die Beziehung

$$\operatorname{Re} \left\{ \frac{d}{dz} (u_\mu' \bar{u}_\nu - \bar{u}_\nu' u_\mu) \right\} = \frac{d}{dz} \operatorname{Re} \{ u_\mu' \bar{u}_\nu - \bar{u}_\nu' u_\mu \} = 0 \quad . \quad (4.91)$$

Die Integration liefert die Lagrange–Helmholtzschen Beziehungen

$$\operatorname{Re} \{ u_\mu' \bar{u}_\nu - \bar{u}_\nu' u_\mu \} = C_{\mu\nu} = -C_{\nu\mu} \quad (4.92)$$

mit den *reellen* Helmholtzkonstanten $C_{\mu\nu}$. Da die Differentialgleichung (4.86) insgesamt *vier* linear unabhängige Lösungen besitzt, existieren *sechs* Lagrange–Helmholtzsche Beziehungen. Drückt man die Lösungen u_ν von (4.85) wieder durch die Lösungen w_ν von (4.81) aus, lauten die Beziehungen

$$C_{\mu\nu} = \sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ w_\mu' \bar{w}_\nu - \bar{w}_\nu' w_\mu - 2i\chi' w_\mu \bar{w}_\nu \} \quad . \quad (4.93)$$

Für den Fundamentalbahnsatz mit den Anfangsbedingungen (4.83) erhält man

$$\begin{aligned} C_{\alpha\gamma} &= -C_{\gamma\alpha} = \sqrt{U^*} \quad , & C_{\alpha\beta} &= -C_{\beta\alpha} = 0 \quad , \\ C_{\beta\delta} &= -C_{\delta\beta} = \sqrt{U^*} \quad , & C_{\alpha\delta} &= -C_{\delta\alpha} = 0 \quad , \\ C_{\gamma\delta} &= -C_{\delta\gamma} = -2\chi'(z_i)\sqrt{U^*} \quad , & C_{\beta\gamma} &= -C_{\gamma\beta} = 0 \end{aligned} \quad (4.94)$$

als Helmholtz-Konstanten, wobei

$$U^* = \Phi^*(z_i) \quad (4.95)$$

das relativistisch korrigierte Potential auf der Achse in der Ebene z_i bezeichnet. Falls das axiale Magnetfeld $B = -\Psi'$ in der Startebene z_i verschwindet, verschwindet wegen $\chi'(z_i) = 0$ auch die Konstante $C_{\gamma\delta}$.

4.4.4 Nichtlinearer Anteil der Abbildung

Zur Berechnung der nichtlinearen Bahnanteile verwendet man das Verfahren der sukzessiven Approximation. Ausgehend vom Fundamentalbahnsystem der paraxialen Bahngleichung benutzt man die Methode der Variation der Konstanten:

$$w(z) = \sum_{i=0}^4 (a_i + G_i[a_j, \kappa, z]) \cdot w_i(z) \quad . \quad (4.96)$$

Hierbei werden die Parameter $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ und die Bahnen $w_\alpha, w_\beta, w_\gamma, w_\delta$ mit a_i beziehungsweise mit $w_i, i = 1, 2, 3, 4$ bezeichnet. Zur kompakteren Darstellung wird die abkürzende Schreibweise

$$\tilde{g}[a_j, \dots] := \tilde{g}(a_1, a_2, a_3, a_4, \dots) \quad (4.97)$$

für Funktionen der Parameter a_1, a_2, a_3, a_4 verwendet. Die *reellen* Variationsfunktionen G_i werden formal in eine Potenzreihe

$$G_i[a_j, \kappa, z] = \sum_{r=0}^{\infty} G_i^{(r)}[a_j, \kappa, z] \quad (4.98)$$

entwickelt, wobei die $G_i^{(r)}$ homogene Polynome der Stufe r in den Entwicklungsparametern a_1, a_2, a_3, a_4 und κ sind. Die Summe der Exponenten von a_1, a_2, a_3, a_4 innerhalb eines Monoms wird als Seidelsche Ordnung und die Summe der Exponenten von a_1, a_2, a_3, a_4 und κ als Stufe bezeichnet [52, 53].

Falls die optische Achse mit einer Elektronenbahn übereinstimmt, verschwindet der Term nullter Stufe $G_i^{(0)}$ in der Summe (4.98). Der Vollständigkeit halber

werden jedoch bei der Beschreibung des allgemeinen Verfahrens auch mit einer Elektronenbahn nicht übereinstimmende Achsen mitbehandelt. Mit der Reihenentwicklung (4.98) ergibt sich als Potenzreihenentwicklung für w nach den Entwicklungsparametern a_1, a_2, a_3, a_4 und κ

$$w[a_j, \kappa, z] = \sum_{r=0}^{\infty} w^{(r)}[a_j, \kappa, z] \quad (4.99)$$

$$\text{mit} \quad w^{(r)} = \sum_{i=1}^4 \left(\delta_{r1} a_i + G_i^{(r)} \right) w_i \quad . \quad (4.100)$$

Das homogene Polynom r -ter Ordnung $w^{(r)}$ wird mit Bahnstörung r -ter Stufe bezeichnet. Es besteht aus

$$N_r = \binom{5+r-1}{r} \quad (4.101)$$

einzelnen Monomen. Die z -abhängigen Koeffizienten der Monome bezeichnet man als Fehlerbahnen. Es gibt 15 Fehlerbahnen 2. Stufe und 35 Fehlerbahnen 3. Stufe. Das Polynom $w^{(2)}$ hat beispielsweise die Gestalt

$$\begin{aligned} w^{(2)} = & w_{\alpha\alpha} \alpha^2 + w_{\alpha\beta} \alpha\beta + w_{\alpha\gamma} \alpha\gamma + w_{\alpha\delta} \alpha\delta + w_{\alpha\kappa} \alpha\kappa \\ & + w_{\beta\beta} \beta^2 + w_{\beta\gamma} \beta\gamma + w_{\beta\delta} \beta\delta + w_{\beta\kappa} \beta\kappa + w_{\gamma\gamma} \gamma^2 \\ & + w_{\gamma\delta} \gamma\delta + w_{\gamma\kappa} \gamma\kappa + w_{\delta\delta} \delta^2 + w_{\delta\kappa} \delta\kappa + w_{\kappa\kappa} \kappa^2 \quad . \end{aligned} \quad (4.102)$$

Es existiert eine Erweiterung dieses Verfahrens [54], das als zusätzliche Entwicklungsparameter ε_i die Stärken von Störmultipolen durch die Dejustierungen der elektronenoptischen Elemente berücksichtigt. In diesem verallgemeinerten Fall wird die Summe der Exponenten eines Monoms in $a_1, a_2, a_3, a_4, \kappa$ und den Störparametern ε_i als *Rang* bezeichnet. Zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten von (4.99) existieren zwei unterschiedliche *analytische* Verfahren.

Bahnmethode

Die Bahnmethode geht von der Taylorentwicklung der exakten Bewegungsgleichung (4.75) aus. Setzt man die Reihenentwicklung (4.99) in die Differentialgleichung ein und sortiert nach Potenzen von a_1, a_2, a_3, a_4 und κ , so ergibt sich formal

$$\begin{aligned} L[\sum_{r=0}^{\infty} w^{(r)}, z] &= \sum_{r=0}^{\infty} L[w^{(r)}, z] = \sum_{k=0}^{\infty} \sigma^{(k)} [\sum_{r=0}^{\infty} w^{(r)}, \kappa, z] \\ &= \sum_{r=0}^{\infty} s^{(r)} [w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}, \kappa, z] \quad . \end{aligned} \quad (4.103)$$

Die Terme $s^{(r)}$ enthalten dabei alle diejenigen Produkte von $w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}$ und κ , die genau r -ter Stufe sind. Terme, in denen $w^{(r)}$ linear auftritt, kommen in $s^{(r)}$ nicht vor, da diese bereits in $L[w^{(r)}, z]$ berücksichtigt werden. Diese Bedingungsgleichung muß für jede Entwicklungsordnung erfüllt sein:

$$L[w^{(r)}, z] = s^{(r)}[w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}, \kappa, z] \quad , \quad r = 0, \dots, \infty \quad . \quad (4.104)$$

Führt man durch die Substitution

$$\{ \quad a_i \rightarrow \beta a_i \quad , \quad \kappa \rightarrow \beta \kappa \quad \} \quad \Rightarrow \quad w^{(r)} \rightarrow \beta^r w^{(r)} \quad (4.105)$$

den Entwicklungsparameter β ein, so geht (4.99) in

$$w = \sum_{r=0}^{\infty} \beta^r w^{(r)} \quad (4.106)$$

über. Der Störterm $s^{(r)}$ entspricht dem Taylorglied r -ter Ordnung der Entwicklung von σ nach β

$$\begin{aligned} s^{(r)} &= \frac{1}{r!} \partial_{\beta}^r \sigma \left[\sum_{l=0}^{\infty} \beta^l w^{(l)}, \beta \kappa, z \right] \Big|_{\beta=0} \\ &= \frac{1}{r!} \left\{ \partial_{\beta}^r \sum_{k=0}^r \sigma^{(k)} \left[\sum_{l=0}^{\infty} \beta^l w^{(l)}, \beta \kappa, z \right] \right\} \Big|_{\beta=0} . \end{aligned} \quad (4.107)$$

Es werden nur Entwicklungsordnungen $\sigma^{(k)}$ mit $k \leq r$ berücksichtigt, da nur diese zu $s^{(r)}$ beitragen können. Mit Hilfe der Beziehungen

$$\begin{aligned} \partial_{w^{(h)}} \sigma^{(k)} &= \frac{\partial w}{\partial w^{(h)}} \partial_w \sigma^{(k)} = \beta^h \partial_w \sigma^{(k)} = \beta^{(h-1)} (\beta \partial_w \sigma^{(k)}) = \beta^{h-1} \partial_{w^{(1)}} \sigma^{(k)} \quad , \\ \sigma^{(k)} [\beta w^{(1)}, \beta \kappa, z] &= \beta^k \sigma^{(k)} [w^{(1)}, \kappa, z] \end{aligned} \quad (4.108)$$

und der Abkürzung

$$D^{(h)} = 2\text{Re} \left\{ w^{(h)} \partial_{w^{(1)}} + w^{(h)'} \partial_{w^{(1)'}} \right\} \quad (4.109)$$

erhält man für die Taylorentwicklung von $\sigma^{(k)}$ nach den Variablen $w^{(0)}, w^{(1)}, w^{(2)}, w^{(3)}, \dots$ um den Entwicklungspunkt $w_0 = \beta w^{(1)}$ herum

$$\begin{aligned} \sigma^{(k)} &= \exp \left(\sum_{h=0}^{\infty} 2\text{Re} \left\{ w^{(h)} \partial_{\tilde{w}^{(h)}} + w^{(h)'} \partial_{\tilde{w}^{(h)'}} \right\} \right) \sigma^{(k)} \left[\sum_{l=0}^{\infty} \beta^l \tilde{w}^{(l)}, \beta \kappa, z \right] \Big|_{\substack{\tilde{w}^{(i)} \rightarrow 0, i \neq 1 \\ \tilde{w}^{(1)} \rightarrow w^{(1)}}} \\ &= \exp \left(\sum_{h=0}^{\infty} \beta^{h-1} D^{(h)} \right) \sigma^{(k)} [\beta w^{(1)}, \beta \kappa, z] \\ &= \beta^k \exp \left(\sum_{h=0}^{\infty} \beta^{h-1} D^{(h)} \right) \sigma^{(k)} [w^{(1)}, \kappa, z] \quad . \end{aligned} \quad (4.110)$$

Mit Hilfe dieser Taylorentwicklung ergibt sich für das Störglied r -ter Stufe [53, 55]

$$s^{(r)} = \frac{1}{r!} \left\{ \partial_\beta^r \sum_{k=0}^r \beta^k \exp \left(\sum_{h=0}^{r-k+1} \beta^{h-1} D^{(h)} \right) \sigma^{(k)}[w^{(1)}, \kappa, z] \right\} \Big|_{\beta=0} . \quad (4.111)$$

Innerhalb der Exponentialfunktion wird nur bis zur Stufe $r - k + 1$ summiert, da alle Summenglieder mit $h > r - k + 1$ nur Terme mit größerer Stufe als r erzeugen.

Setzt man (4.100) in (4.104, 4.76) ein und beachtet die Linearität von $L[w, z]$ in den Variablen w'', w', w, \bar{w} sowie $L[w_i, z] = 0$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} L[w^{(r)}, z] &= \left(\sum_{i=1}^4 G_i^{(r)'} w_i \right)' + \sum_{i=1}^4 G_i^{(r)'} w_i' \\ &\quad + \frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi' + i v_0 \Psi') \sum_{i=1}^4 G_i^{(r)'} w_i \\ &= s^{(r)}[w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}, \kappa, z] . \end{aligned} \quad (4.112)$$

Der Real- und der Imaginärteil dieser komplexen Differentialgleichung bilden ein System aus *zwei reellen* Differentialgleichungen *erster* Ordnung für die Ableitungen $G_i^{(r)'}$ der *vier reellen* Variationsfunktionen. Dieses System ist unterbestimmt, so daß wir noch zwei zusätzliche *reelle* oder eine komplexe Differentialgleichung zur eindeutigen Bestimmung der $G_i^{(r)'}$ frei vorgeben können. Sinnvollerweise wählt man als zusätzliche Gleichung

$$\sum_{i=1}^4 G_i^{(r)'} w_i = 0 \quad , \quad (4.113)$$

so daß das Differentialgleichungssystem für die r -te Stufe

$$\sum_{i=1}^4 G_i^{(r)'} w_i' = s^{(r)}[w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}, \kappa, z] \quad (4.114)$$

$$\sum_{i=1}^4 G_i^{(r)'} w_i = 0 \quad (4.115)$$

eine möglichst einfache Gestalt annimmt. Subtrahiert man das Produkt von Gleichung (4.115) mit dem Faktor $\sqrt{\Phi^*}(\bar{w}'_\mu + 2i\chi' \bar{w}_\mu)$ vom Produkt von (4.114) mit $\sqrt{\Phi^*} \bar{w}_\mu$, so erhält man ein komplexes Gleichungssystem, dessen Realteil sich

durch die Helmholtzkonstanten darstellen läßt:

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=1}^4 G_{\nu}^{(r)'} \sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ w_{\nu}' \bar{w}_{\mu} - w_{\nu} \bar{w}_{\mu}' - 2i\chi' \bar{w}_{\mu} w_{\nu} \} \\ \stackrel{(4.93)}{=} \sum_{\nu=1}^4 G_{\nu}^{(r)'} C_{\nu\mu} = \sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\mu} \} \end{aligned} \quad (4.116)$$

Für beliebige Fundamentalbahnen muß man die Matrix $C_{\nu\mu}$ invertieren, um die Ableitungen der Variationskonstanten $G_{\nu}^{(r)'}$ zu isolieren. Im Fall der gewählten Fundamentalbahnen mit den Anfangsbedingungen (4.83) sind nur die Helmholtzkonstanten $C_{\alpha\gamma} = -C_{\gamma\alpha} = \sqrt{U^*}$ und $C_{\beta\delta} = -C_{\delta\beta} = \sqrt{U^*}$ von Null verschieden, falls die Startebene z_i innerhalb eines magnetfeldfreien Bereiches liegt. In diesem Fall ergeben sich die Beziehungen

$$\begin{aligned} G_{\alpha}^{(r)'} \sqrt{U^*} &= \sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\gamma} \} \quad , \\ G_{\gamma}^{(r)'} \sqrt{U^*} &= -\sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\alpha} \} \quad , \\ G_{\beta}^{(r)'} \sqrt{U^*} &= \sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\delta} \} \quad , \\ G_{\delta}^{(r)'} \sqrt{U^*} &= -\sqrt{\Phi^*} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\beta} \} \quad . \end{aligned} \quad (4.117)$$

Beachtet man bei der Integration dieser Gleichungen, daß die Bahnstörungen r -ter Stufe $w^{(r)}$ für alle $r \neq 1$ in der Startebene z_i verschwinden sollen, so erhält man nach Einsetzen in (4.100)

$$\begin{aligned} w^{(r)}(z) &= w_{\alpha} \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\gamma} \} dz' - w_{\gamma} \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\alpha} \} dz' \\ &+ w_{\beta} \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\delta} \} dz' - w_{\delta} \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ s^{(r)} \bar{w}_{\beta} \} dz' \\ &+ \delta_{r1} (\alpha w_{\alpha} + \beta w_{\beta} + \gamma w_{\gamma} + \delta w_{\delta}) \quad . \end{aligned} \quad (4.118)$$

Mit Hilfe dieser Formel läßt sich die Bahnstörung r -ter Stufe aus allen vorhergehenden Bahnstörungen niedrigerer Stufe $w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}$ berechnen. Falls die Achse mit einer Elektronenbahn übereinstimmt, so verschwindet wegen $s^{(0)} = \sigma^{(0)} = 0$ die Bahnstörung nullter Ordnung $w^{(0)}$, die ja gerade die Abweichung der wahren Bahn eines mit Sollenergie in der Startebene z_i axial einfallenden Elektrons von der optischen Achse beschreibt. Mit

$$s^{(1)} = \sigma^{(1)} = - \left\{ \frac{\Phi_1}{4\Phi^{*2}} + \frac{\Lambda^2}{4\Phi^{*2}} (\Phi_1 + iv_0\Psi_1) \right\} U\kappa =: \tilde{s}^{(1)}\kappa \quad (4.119)$$

erhält man für die Bahnstörung erster Stufe

$$w^{(1)} = \kappa w_\kappa + \alpha w_\alpha + \beta w_\beta + \gamma w_\gamma + \delta w_\delta \quad (4.120)$$

mit der Dispersionsbahn

$$\begin{aligned} w_\kappa(z) = & w_\alpha \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ \tilde{s}^{(1)} \bar{w}_\gamma \} dz' - w_\gamma \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ \tilde{s}^{(1)} \bar{w}_\alpha \} dz' \\ & + w_\beta \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ \tilde{s}^{(1)} \bar{w}_\delta \} dz' - w_\delta \int_{z_i}^z \sqrt{\frac{\Phi^*}{U^*}} \operatorname{Re} \{ \tilde{s}^{(1)} \bar{w}_\beta \} dz' . \end{aligned} \quad (4.121)$$

Die Bahn κw_κ beschreibt die Abweichung von der optischen Achse axial in der Ebene z_i startender Elektronen ($w(z_i) = 0, w'(z_i) = 0$), deren Energie sich um κE_0 von der Sollenergie E_0 unterscheidet. Sie ist nur bei Vorhandensein elektrischer und/oder magnetischer Dipolfelder von Null verschieden.

Eikonalmethode

Im Gegensatz zur Bahnmethode wird bei der Eikonalmethode zuerst die reelle Variationsfunktion μ (4.65) nach Durchführung der Substitution (4.70) in eine Potenzreihe

$$\mu[w, \kappa, z] = \sum_{r=0}^{\infty} \mu^{(r)}[w, \kappa, z] \quad (4.122)$$

in w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ entwickelt. Anschließend wird der Euleroperator

$$\mathcal{E} = 2 \left(\frac{d}{dz} \partial_{\bar{w}'} - \partial_{\bar{w}} \right) \quad (4.123)$$

auf (4.122) angewendet. Jede Entwicklungsordnung $\mu^{(r)}$ muß dabei die Gleichung

$$(\mathcal{E}\mu)^{(r)} = \mathcal{E}\mu^{(r+1)} = 0 \quad , \quad r = 0, \dots, \infty \quad (4.124)$$

erfüllen. Der in w, \bar{w}, w', \bar{w}' lineare Anteil ist hierbei gegeben durch

$$L[w, z] = \frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}} (\mathcal{E}\mu^{(2)})|_{\kappa=0} . \quad (4.125)$$

Hierbei wurde $L[w, z]$ so normiert, daß der Vorfaktor vor w'' Eins ist. Aufgrund der Struktur der reellen Funktion μ treten keine linearen Anteile in \bar{w}' und \bar{w}'' auf. Mit der Definition

$$\mu_E := \mu - \mu^{(2)}|_{\kappa=0} \quad (4.126)$$

erhält man für die Taylorentwicklung der exakten Bahngleichung

$$L[w, z] = -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}} \mathcal{E}\mu_E[w, \kappa, z] \quad . \quad (4.127)$$

In μ_E sind alle in w, \bar{w}, w', \bar{w}' linearen Terme von μ beseitigt. Die lineare Ordnung $L[w, z]$ der Eikonalmethode unterscheidet sich durch das Fehlen der letzten Zeile vom $L[w, z]$ (4.76) der Bahnmethode. Falls die Achse mit einer Elektronenbahn übereinstimmt, verschwindet diese Zeile im Ausdruck für das $L[w, z]$ der Bahnmethode. Dann ergeben sich für beide Methoden die gleiche paraxiale Bahngleichung (4.81) und somit auch das gleiche Fundamentalbahnssystem $w_i, i = 1, 2, 3, 4$.

Wie bei der Bahnmethode wird die exakte Lösung formal nach Potenzen der Anfangsposition und -steigung $a_i, i = 1, 2, 3, 4$ in der Startebene z_i sowie der relativen Energieabweichung κ entwickelt. Setzt man (4.99) in μ ein und sortiert nach den Termen gleicher Stufe, erhält man analog zur Bahnmethode die Entwicklung der Variationsfunktion

$$\mu = \sum_{r=0}^{\infty} m^{(r)}[a_i, \kappa, z] \quad (4.128)$$

mit den Störtermen r -ter Stufe

$$m^{(r)} = \frac{1}{r!} \left\{ \partial_{\beta}^r \sum_{k=0}^r \beta^k \exp \left(\sum_{h=0}^{r-k+1} \beta^{h-1} D^{(h)} \right) \mu^{(k)}[w^{(1)}, \kappa, z] \right\} \Big|_{\beta=0} \quad . \quad (4.129)$$

Mit der sich aus

$$w = w(w^{(0)}, w^{(1)}, \dots) = \sum_{i=0}^{\infty} w^{(i)} \quad (4.130)$$

ergebenden Beziehung $\partial w / \partial w^{(1)} = 1$ erhält man für die Euler–Lagrange Gleichung

$$\mathcal{E}\mu = \mathcal{E}^{(1)}\mu = \sum_{r=0}^{\infty} \mathcal{E}^{(1)}m^{(r)} \quad , \quad (4.131)$$

mit dem Differentialoperator

$$\mathcal{E}^{(1)} = 2 \left(\frac{d}{dz} \partial_{\bar{w}^{(1)'}} - \partial_{\bar{w}^{(1)}} \right) \quad . \quad (4.132)$$

Da $\mathcal{E}^{(1)}$ die Stufe gerade um eins vermindert, ergibt sich die r -te Stufe von $\mathcal{E}\mu$ zu

$$(\mathcal{E}\mu)^{(r)} = \mathcal{E}^{(1)}m^{(r+1)} = 0 \quad , \quad r = 0, \dots, \infty \quad . \quad (4.133)$$

Die r -te Stufe des Terms $\mathcal{E}\mu^{(2)}|_{\kappa=0}$ enthält die linearen Glieder in $w^{(r)}$ und läßt sich aus $m^{(2)}$ durch

$$(\mathcal{E}\mu^{(2)}|_{\kappa=0})^{(r)} = \begin{cases} \mathcal{E}^{(1)}D^{(r)}m^{(2)} & \text{für } r > 1 \\ \mathcal{E}^{(1)}m^{(2)}|_{\kappa=0} & \text{für } r = 1 \end{cases} \quad (4.134)$$

bestimmen. Der Differentialoperator $D^{(r)}$ ersetzt in allen in $m^{(2)}$ vorkommenden Produkten, die nur die Bahngrößen $w^{(1)}, \bar{w}^{(1)}, \dots$ sowie κ in erster Stufe enthalten, eine Größe $w^{(1)}$ durch $w^{(r)}$. Die anschließende Anwendung von $\mathcal{E}^{(1)}$ sorgt wegen $r \neq 1$ dafür, daß alle entstandenen Anteile mit $w^{(r)}\kappa, \bar{w}^{(r)}\kappa, \dots$ wegfallen und aus den Anteilen mit $w^{(r)}w^{(1)}, w^{(r)}\bar{w}^{(1)}, \dots$ in $w^{(r)}$ lineare Terme entstehen. Dieser Mechanismus zur Aussortierung von in κ linearen Anteilen funktioniert jedoch nicht im Falle $r = 1$, weswegen die obige Fallunterscheidung notwendig wird.

Der Störterm nullter Ordnung

$$-\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}(\mathcal{E}\mu_E)^{(0)} = -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}\mathcal{E}^{(1)}m^{(1)} = \sigma^{(0)} \quad (4.135)$$

ist identisch mit dem Term nullter Ordnung (4.80) der Bahnmethode. Nur falls man eine Elektronenbahn als Achse voraussetzt, erhält man für den Störterm erster Stufe

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}(\mathcal{E}\mu_E)^{(1)} &\stackrel{(4.126)}{=} -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}\left\{(\mathcal{E}\mu)^{(1)} - (\mathcal{E}\mu^{(2)}|_{\kappa=0})^{(1)}\right\} \\ &\stackrel{(4.133)}{=} -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}\mathcal{E}^{(1)}(m^{(2)} - m^{(2)}|_{\kappa=0}) \\ &= -\left(\frac{\Phi_1}{4\Phi^{*2}} + \frac{\Lambda}{2\Phi^*}\Gamma\right)U\kappa \end{aligned} \quad (4.136)$$

das gleiche Resultat (4.119) wie im Falle der Bahnmethode. Im Falle $r > 1$ ergibt sich für die r -te Stufe der Bahngleichung (4.127)

$$L[w^{(r)}, z] = S^{(r)}[w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}, \kappa, z] \quad , \quad (4.137)$$

wobei der Störterm

$$\begin{aligned} S^{(r)}[w^{(0)}, \dots, w^{(r-1)}, \kappa, z] &= -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}(\mathcal{E}\mu_E)^{(r)} = -\frac{1}{2\sqrt{\epsilon\Phi^*}}\mathcal{E}^{(1)}m_E^{(r+1)} \\ \text{mit } m_E^{(r+1)} &= m^{(r+1)} - D^{(r)}m^{(2)} - D^{(r+1)}m^{(1)} \end{aligned} \quad (4.138)$$

wie $s^{(r)}$ im Falle der Bahnmethode nur von den Bahnstörungen bis zur Stufe $(r-1)$ abhängt. Aus $m_E^{(r+1)}$ werden durch Subtraktion von $D^{(r+1)}m^{(1)}$ alle

Terme linear in $w^{(r+1)}$ entfernt, da diese durch Anwendung des Operators $\mathcal{E}^{(1)}$ ohnehin wegfallen.

Analog zur Vorgehensweise in der Bahnmethode gelangt man über die Variation der Konstanten zur Gleichung (4.116), bei der $s^{(r)}$ durch $S^{(r)}$ ersetzt wird. Integriert man die entstehende Gleichung über z und führt man zusätzlich eine partielle Integration des Differentialoperators d/dz im Ausdruck $\mathcal{E}^{(1)}$ durch, ergibt sich

$$\sum_{\nu=1}^4 G_{\nu}^{(r)} C_{\nu\mu} = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \operatorname{Re} \left\{ \bar{w}_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)'} m_E^{(r+1)} \Big|_{z'=z_i} - \int_{z_i}^z \{ \bar{w}'_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)'} + \bar{w}_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)} \} m_E^{(r+1)} dz' \right\} . \quad (4.139)$$

Die obere Grenze des Randterms liefert keinen Beitrag zur Bahnstörung r -ter Stufe [56] und wird daher weggelassen. Mit Hilfe der Beziehungen

$$\begin{aligned} \partial_{a_{\mu}} w^{(1)} &= w_{\mu} \quad \text{sowie} \\ \partial_{\bar{w}^{(h)}} m_E^{(r+1)} &= \partial_{\bar{w}^{(h)}} m^{(r+1)} \quad \text{für } h \neq 1 \text{ und } h \neq r \end{aligned} \quad (4.140)$$

für $r > 1$ erhält man die Ableitung von m_E nach einem der vier Anfangswerte a_{μ}

$$\begin{aligned} \partial_{a_{\mu}} m_E^{(r+1)} &= 2 \operatorname{Re} \left\{ (\bar{w}_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)} + \bar{w}'_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)'}) m_E^{(r+1)} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{h=2}^{r-1} (\partial_{a_{\mu}} \bar{w}^{(h)}) \partial_{\bar{w}^{(h)}} m^{(r+1)} + (\partial_{a_{\mu}} \bar{w}^{(h)'}) \partial_{\bar{w}^{(h)'}} m^{(r+1)} \right\} . \end{aligned} \quad (4.141)$$

Hierbei braucht man nur bis $r-1$ zu summieren, weil aus m_E bereits alle Terme, die $w^{(r)}$ und $w^{(r+1)}$ enthalten, eliminiert sind. Mit Hilfe der aus (4.129) herleitbaren Beziehung

$$\partial_{\bar{w}^{(h)}} m_E^{(r+1)} = \partial_{\bar{w}(1)} m^{(r+2-h)} \quad (4.142)$$

erhält man unter Berücksichtigung der Beziehung

$$\mathcal{E}^{(1)} m^{(r+1)} = 0 \quad \Rightarrow \quad \partial_{\bar{w}(1)} m^{(r+2-h)} = \frac{d}{dz} \partial_{\bar{w}(1)'} m^{(r+2-h)} \quad (4.143)$$

für die Ableitung die Form

$$\begin{aligned} \partial_{a_{\mu}} m_E^{(r+1)} &= 2 \operatorname{Re} \left\{ (\bar{w}_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)} + \bar{w}'_{\mu} \partial_{\bar{w}(1)'}) m_E^{(r+1)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{d}{dz} \sum_{h=2}^{r-1} (\partial_{a_{\mu}} \bar{w}^{(h)}) \partial_{\bar{w}(1)'} m^{(r+2-h)} \right\} . \end{aligned} \quad (4.144)$$

Mit Hilfe von (4.144) läßt sich (4.139) umformen zu

$$\sum_{\nu=1}^4 G_{\nu}^{(r)} C_{\nu\mu} = \frac{1}{2\sqrt{\epsilon}} \left\{ \partial_{a_{\mu}} \int_{z_i}^z m_E^{(r+1)} dz' - 2\operatorname{Re} \left\{ \bar{w}_{\mu} \partial_{\bar{w}^{(1)'}} m_E^{(r+1)} \Big|_{z'=z_i} \right\} \right. \\ \left. - 2\operatorname{Re} \left\{ \sum_{h=2}^{r-1} (\partial_{a_{\mu}} \bar{w}^{(h)}) \partial_{\bar{w}^{(1)'}} m^{(r+2-h)} \Big|_{z'=z} \right\} \right\} . \quad (4.145)$$

Da sämtliche Bahnstörungen $w^{(h)}$ mit $h > 1$ und deren Ableitungen $w^{(h)'}$ so gewählt werden, daß sie für beliebige Werte der a_{μ} , $\mu = 1, 2, 3, 4$ in der Startebene identisch verschwinden, gilt auch

$$\partial_{a_{\mu}} \bar{w}^{(h)} \Big|_{z'=z_i} = 0 . \quad (4.146)$$

Deshalb verschwindet der zweite Randterm an der unteren Integrationsgrenze $z' = z_i$ in (4.145). Der zweite Randterm an der oberen Integrationsgrenze $z' = z$ trägt zu Bahnstörungen dritter und höherer Stufe bei, falls sämtliche niedrigeren Bahnstörungen nicht identisch verschwinden. Liegt die Startebene z_i in einem feldfreien Bereich und verschwindet dort die Krümmung der Achse, erhält man als einzigen Randtermbeitrag zur Bahnstörung zweiter Stufe $w^{(2)}$

$$\bar{w}_{\mu} \partial_{\bar{w}^{(1)'}} m_E^{(3)} \bar{w}_{\mu} \Big|_{\substack{z'=z_i \\ \Gamma=0 \\ \text{Felder}=0}} = \bar{w}_{\mu i} \frac{\Lambda}{4\Phi^*} U \kappa w_i^{(1)'} . \quad (4.147)$$

Dieser Randterm trägt nur zum Farbfehler bei. Für den Satz von Fundamentalbahnen mit den Anfangsbedingungen (4.83) erhält man als Randtermanteil zweiter Stufe

$$w^{(2)} \Big|_{Rand} := \frac{\Lambda U \kappa}{4\Phi^* \sqrt{\epsilon U^*}} \{ (\alpha + \gamma w'_{\gamma i}) w_{\alpha} - (\beta + \delta w'_{\delta i}) w_{\beta} \} , \quad (4.148)$$

da auch die Ableitung der Dispersionsbahn in der Startebene $z' = z_i$ verschwindet. Alle mit dem Index i versehenen Größen geben den zugehörigen Wert in der Startebene an.

Die Eikonalmethode hat den Vorteil, daß sich abgesehen von den Farbfehlern alle Bahnstörungen niedrigster Ordnung als „Gradient“ eines *reellen* Polynoms ergeben. Dadurch lassen sich lineare Zusammenhänge zwischen den komplexen Fehlerbahnen ableiten lassen, die beispielsweise zur Überprüfung von berechneten Fehlerbahnen sehr nützlich sind. Bei höheren Stufen stellt jedoch die Randtermbehandlung eine mögliche Fehlerquelle dar, so daß sich der Einsatz der Bahnmethode empfiehlt. Durch den Einsatz moderner Computeralgebrasysteme wie **Maple**® oder **Mathematica**® können Flüchtigkeitsfehler bei der Berechnung der Integranden für die einzelnen Fehlerbahnen weitgehend ausgeschlossen werden.

Kapitel 5

Grundaufbau des Monochromators

Um das Design möglichst einfach zu halten, ist es sinnvoll, sich auf eine torsionsfreie optische Achse zu beschränken. Diese liegt dann im Raum innerhalb einer Ebene, die wir als xz -Ebene unseres Koordinatensystems wählen. Damit ein Elektron, das längs der optischen Achse fliegt, die xz -Ebene nicht verläßt, muß die y -Komponente des elektrischen Feldes verschwinden. Dies ist nur dann erfüllt, wenn in diesem System für das Potential

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x, -y, z) \quad (5.1)$$

gilt. Diese Symmetrie wird als Einschnittsymmetrie bezeichnet und ist in Abbildung 5.1 verdeutlicht.

5.1 Aufbau und Anordnung der Ablenkelemente

Der Monochromator sollte aus Gründen der technischen Realisierbarkeit nur aus elektrostatischen Komponenten bestehen (vergleiche Kapitel 3). Er muß aus dispersiven Elementen aufgebaut sein, da die Elektronen nach ihrer Energie räumlich getrennt werden müssen, um eine Filterung zu ermöglichen. In einem rein elektrostatischen System tritt starke Dispersion nur bei Anwesenheit von Dipolfeldern auf (siehe Gleichungen (4.119) und (4.121)). Die optische Achse ist daher gekrümmt.

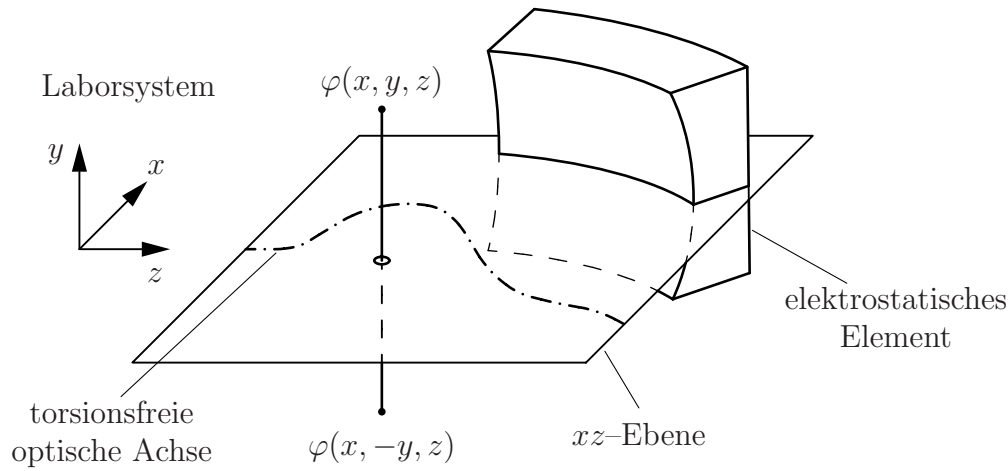


Abbildung 5.1: Einschnittsymmetrie.

Mit Hilfe der Potentialentwicklung (4.32) läßt sich zeigen, daß für Systeme mit Einschnittsymmetrie aufgrund der Beziehung (5.1) sämtliche Multipolkomponenten Φ_i entlang der optischen Achse *reell* sind.

Aus Gründen der Stabilität der Mikroskopsäule sowie der Justierung des Mikroskops sollte der Monochromator geradsichtig sein, so daß die optische Achse des Systems durch den Monochromator weder versetzt noch in ihrer Richtung geändert wird. Die Krümmungen und Versetzungen der optischen Achse innerhalb des Monochromators müssen daher in der Ausgangsebene wieder kompensiert sein.

Um die Bildfehler des Monochromators möglichst klein zu halten ist es sinnvoll, die Elektroden symmetrisch zu einer Ebene senkrecht zur Ebene der Einschnittsymmetrie anzuordnen. Als Grundaufbau für den Monochromator wurde die in Abbildung 5.2 skizzierte Anordnung aus zwei Paaren elektrostatischer Sektorfeldablenker gewählt. Beide Paare sind jeweils symmetrisch zu der gemeinsamen Symmetrieebene z_s angeordnet. Das Dipolfeld eines Ablenkers lenkt Elektronen der Sollenergie und damit auch die optische Achse um den Winkel ϕ von der ursprünglichen Richtung ab. Die Ablenker sind dabei relativ zueinander so positioniert, daß die Achse die Form eines Omegas aufweist. Die Ebene, die die Achse enthält, ist die Ebene der Einschnittsymmetrie. Sie wird im folgenden als horizontaler Ω -Schnitt bezeichnet.

vertikaler Querschnitt

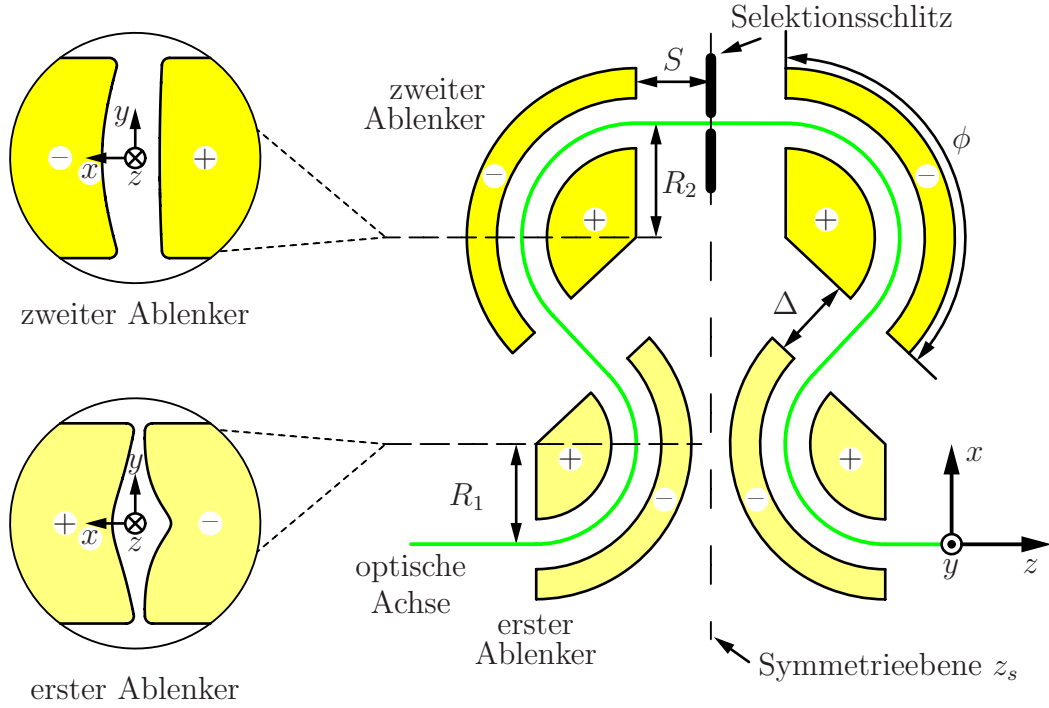
horizontaler Ω -Schnitt

Abbildung 5.2: Aufbau des Monochomators.

5.2 Sektorfeldablenker in SCOFF-Näherung

Für einen toroidförmigen Ablenker mit Einschnittsymmetrie (Abbildung 5.3) ist die Potentialverteilung um seine Mittelachse rotationssymmetrisch. Als Entwicklungsachse für das Potential wählt man zweckmäßigerweise einen Kreis in der Ebene der Einschnittsymmetrie mit dem Radius R und dem Mittelpunkt auf der Mittelachse. Aufgrund der Rotationssymmetrie sind das Achspotential Φ und alle höheren Multipolmomente $\Phi_i, i > 0$ entlang dieser Achse konstant.

In Kapitel 4 wurde gefordert, daß die Entwicklungsachse auch gleichzeitig eine mögliche Bahn für Elektronen der Sollenergie $E_0 = eU$ sein soll. Daher müssen die Potentiale auf den Elektroden so gewählt werden, daß entlang der Entwicklungsachse $\varphi = \Phi = U$ gilt. Außerdem ist das notwendige Dipolmoment Φ_1 durch die nichtrelativistische Näherung der Bedingung (4.80)

$$\varkappa = \frac{1}{R} = \frac{\Phi_1}{2\Phi} = \frac{\Phi_1}{2U} \quad (5.2)$$

durch den Radius R und das Achspotential $\Phi = U$ festgelegt.

Schneidet man einen Sektor als Ablenker aus dem Toroiden heraus, bleibt in der inneren Zone des Sektorablenkelements – fern von der Eintritts- und der Austrittskante – das Potential in guter Näherung gleich dem Potential des Volltoroiden. Bei der Sharp Cut-Off Fringe Field Näherung (SCOFF) nimmt man an, daß das Potential im Sektor zwischen Ein- und Austrittskante mit dem des Volltoroiden übereinstimmt. An den Kanten geht das Potential abrupt in das als konstant angenommene Potential $\varphi(x, y, z) = U$ des Außenraums über.

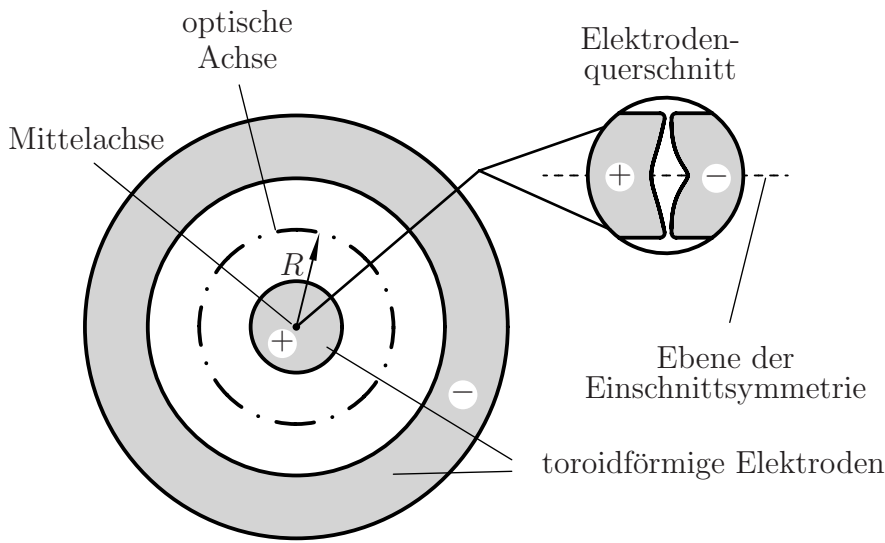


Abbildung 5.3: Toroidförmiger Ablenker.

Der Ablenker wird so justiert, daß die optische Achse des Systems gerade im Abstand R vom Mittelpunkt des Ablenkers senkrecht auf die Eintrittsebene trifft. Dann geht die Achse im Rahmen der SCOFF-Näherung an der Eintrittsebene unmittelbar in einen Kreisbogen mit Radius R über. Die Achse verläßt den Ablenker wieder senkrecht zur Austrittsebene und im Abstand R zum Mittelpunkt des Ablenkers. Die optische Achse setzt sich daher in SCOFF-Näherung aus Geraden und Kreisbögen zusammen wie in Abbildung 5.2 gezeigt. Das Potential entlang der Achse bleibt dabei konstant.

Die Form des Querschnittsprofils der Elektroden bestimmt die Multipolkomponenten höherer Ordnung entlang der optischen Achse und damit auch die paraxialen Abbildungseigenschaften des Systems.

5.3 Berechnung der Elektrodenformen

Für den Spezialfall konstanter Multipolmomente $\Phi_i = \text{const.}$ entlang einer Achse mit konstanter komplexer Krümmung $\Gamma = \text{const.}$ lassen sich nach [57] explizite Ausdrücke für die Koeffizienten $b_{\mu\nu}$ der Potentialentwicklung (4.25) aus der Rekursionsformel (4.27) gewinnen. Allerdings sind die in [57] angegebenen Ausdrücke für die Entwicklungskoeffizienten $b_{\mu\nu}$ fehlerhaft. Die korrekten Koeffizienten lauten für $\mu \geq 1$ und $\nu \geq 1$

$$b_{\mu\nu} = \frac{1}{2^{3(\mu+\nu)+1}} \binom{2\mu}{\mu} \binom{2\nu}{\nu} \left\{ \sum_{\lambda=1}^{\nu} \bar{\Gamma}^{\mu} \Gamma^{\nu-\lambda} \frac{2^{3\lambda} \lambda!^2}{(2\lambda)!} \binom{\mu + \nu - \lambda - 1}{\nu - \lambda} \Phi_{\lambda} + \sum_{\lambda=1}^{\mu} \bar{\Gamma}^{\mu-\lambda} \Gamma^{\nu} \frac{2^{3\lambda} \lambda!^2}{(2\lambda)!} \binom{\mu + \nu - \lambda - 1}{\mu - \lambda} \bar{\Phi}_{\lambda} \right\} , \quad (5.3)$$

wobei $b_{\mu\nu} = \bar{b}_{\nu\mu}$ gilt. Die Koeffizienten für $\mu = 0$ oder $\nu = 0$ sind durch die Beziehung (4.31) mit den Multipolmomenten verknüpft.

Der Spezialfall konstanter *reeller* Krümmung $\Gamma = \varkappa = 1/R$ und konstanter reeller Multipolmomente entlang der Achse entspricht gerade dem toroidförmigen Ablenker mit Einschnittsymmetrie und kreisförmiger Entwicklungsachse aus dem vorhergehenden Abschnitt. In diesem Fall erhält man für die Potentialentwicklung

$$\hat{\varphi} = \frac{\varphi}{U} = \sum_{\mu=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \hat{b}_{\mu\nu} \left(\frac{w}{R} \right)^{\mu} \left(\frac{\bar{w}}{R} \right)^{\nu} \quad (5.4)$$

mit den normierten reellen Koeffizienten

$$\hat{b}_{\mu\nu} = \hat{b}_{\nu\mu} = \frac{1}{2^{3(\mu+\nu)+1}} \binom{2\mu}{\mu} \binom{2\nu}{\nu} \left\{ \sum_{\lambda=1}^{\nu} \frac{2^{3\lambda} \lambda!^2}{(2\lambda)!} \binom{\mu + \nu - \lambda - 1}{\nu - \lambda} \left(\frac{\Phi_{\lambda}}{U} R^{\lambda} \right) + \sum_{\lambda=1}^{\mu} \frac{2^{3\lambda} \lambda!^2}{(2\lambda)!} \binom{\mu + \nu - \lambda - 1}{\mu - \lambda} \left(\frac{\bar{\Phi}_{\lambda}}{U} R^{\lambda} \right) \right\} . \quad (5.5)$$

Das konstante Potential entlang der Achse ist hierbei mit $\Phi(z) = U$ bezeichnet. Durch Einführung der normierten Größen

$$\hat{\varphi} = \frac{\varphi}{U} , \quad \hat{x} = \frac{x}{R} , \quad \hat{y} = \frac{y}{R} , \quad \hat{\Phi}_{\lambda} = \frac{\Phi_{\lambda}}{U} R^{\lambda} \quad (5.6)$$

wird die Potentialberechnung vereinfacht. Sie erfolgt unabhängig von der absoluten geometrischen *Größe* und vom Potential entlang der Achse. Die Lösung

des normierten Potentialproblems für jeden Ablenker kann nachträglich mit Hilfe von (5.6) auf eine beliebige geometrische Größe und ein beliebiges Achsenpotential skaliert werden.

Die geometrische *Form* einer Elektrode des Toroidablenkers ist durch die normierten Multipolstärken und die normierte Elektrodenspannung

$$\hat{U}_E^{(\pm)} = \frac{U_E^{(\pm)}}{U} \quad (5.7)$$

eindeutig bestimmt. Sollen beispielsweise Elektrodenspannungen von $\hat{U}_E^{(\pm)} = (U \pm \Delta U)/U$ verwendet werden, so wählt man als Elektrodenoberflächen die aus der expliziten Reihenentwicklung (5.4) folgenden Äquipotentialflächen für $\hat{\varphi} = \hat{U}_E^{(\pm)}$.

5.4 Sektorfeldablenker mit realen Randfeldern

In der Realität geht das rotationssymmetrische Toroidpotential im Inneren des Ablenkers allmählich in das konstante Potential $\varphi = U$ im Außenraum über. Der Ablenker weist im Betrieb eine endliche Gesamtladung auf. Das Potential des Ablenkers klingt deshalb nur langsam in großer Entfernung mit dem Inversen des Abstands auf Null ab.

In der Praxis ist es sinnvoll, das Feld eines Ablenkers mit einem auf dem Potential U liegenden Gehäuse abzuschirmen, so daß die Felder zweier Ablenker sich gegenseitig nicht beeinflussen. Vor der Eintritts- und nach der Austrittskante befinden Feldblenden mit runden Öffnungen, um den Elektronenstrahl durchzulassen. Jeder Ablenker kann somit als unabhängiges Element behandelt werden. Dies reduziert die Rechenzeit und den Speicherplatz für die Feldsimulation und die Berechnung der elektronenoptischen Eigenschaften deutlich. Das Randfeld kann durch Veränderung des Abstands der Blenden von den Kanten der Ablenker beeinflußt werden.

In den Randfeldzonen geht die reale Achse nicht abrupt sondern allmählich von der Geraden in die Kreisbahn über. Hierbei verläßt ein axiales Elektron auch die Äquipotentialfläche $\varphi = U$. Deshalb weicht das Achspotential Φ im Randfeldbereich leicht vom Sollpotential U ab. Bei der Aufstellung der paraxialen Bahngleichung und der Bestimmung der Bildfehler höherer Ordnung wird daher Φ *nicht* als konstant angenommen.

Ohne Feldblenden wird die Achse durch das weit herausquellende Randfeld zu stark abgelenkt. Daher ist die Gesamtumlenkung der Achse größer als der Sektorwinkel ϕ . Um die optische Achse auf die Kreisbahn mit Radius R im Inneren des Ablenkers einzufädeln, muß man wie in Abbildung 5.4 skizziert unter einem endlichen Winkel und Abstand zur SCOFF-Achse in den Ablenker einstrahlen.

Durch geeignete Wahl des Abstandes d der Feldblenden von den Sektorkanten und der lateralen Position der kreisförmigen Blendenöffnungen gegenüber der SCOFF-Achse kann das Randfeld so stark gedämpft werden, daß die Achse beim Eintritt in den Ablenker zwar mit einem Versatz δx , jedoch parallel zur SCOFF-Achse verläuft (Abbildung 5.5). Der Umlenkwinkel der optischen Achse ist dann gerade gleich dem Sektorwinkel. Hierdurch wird die elektronenoptische Justierung beträchtlich erleichtert. Zur Bestimmung des benötigten Blendenabstandes d und des Strahlversatzes δx ist eine numerische Simulation des Randfeldes notwendig.

Positioniert man den zweiten Ablenker so, daß seine SCOFF-Achse gegenüber der SCOFF-Achse des ersten Ablenkers um $\delta x_1 + \delta x_2$ versetzt ist (Abbildung 5.6), bleibt die Omega-Form der Achse erhalten.

Diejenige Ebene vor der Eintrittsblende des ersten Ablenkers, in der das Ablenkefeld gerade auf ein vernachlässigbares Maß ($\hat{\Phi}_1 < 10^{-5}$) abgeklungen ist, wird im folgenden als Eingangsebene des Monochromators bezeichnet (Abbildung 5.6). Die zur Symmetrieebene z_s spiegelsymmetrische Ebene unmittelbar hinter der Austrittsblende des vierten Ablenkers heißt Ausgangsebene. Die Positionen der Eingangs- und der Ausgangsebene werden mit z_e beziehungsweise z_a bezeichnet.

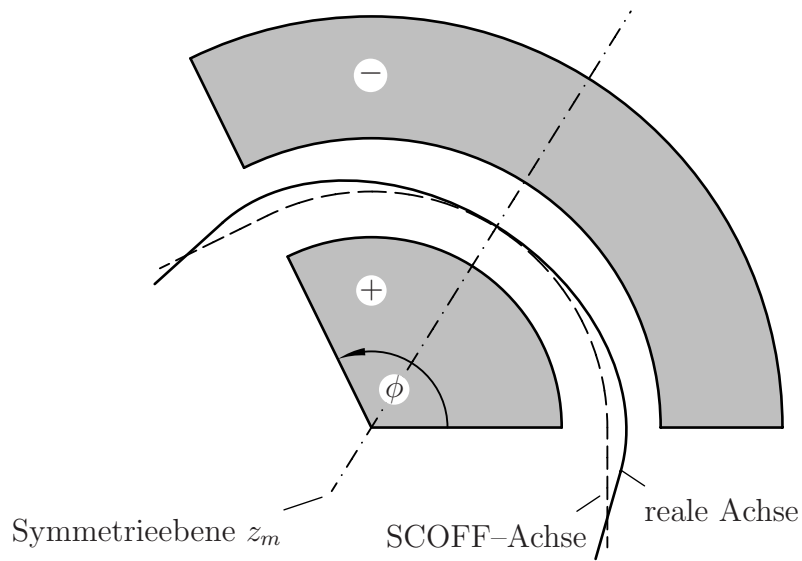


Abbildung 5.4: Optische Achse in einem Ablenker ohne Feldblende.

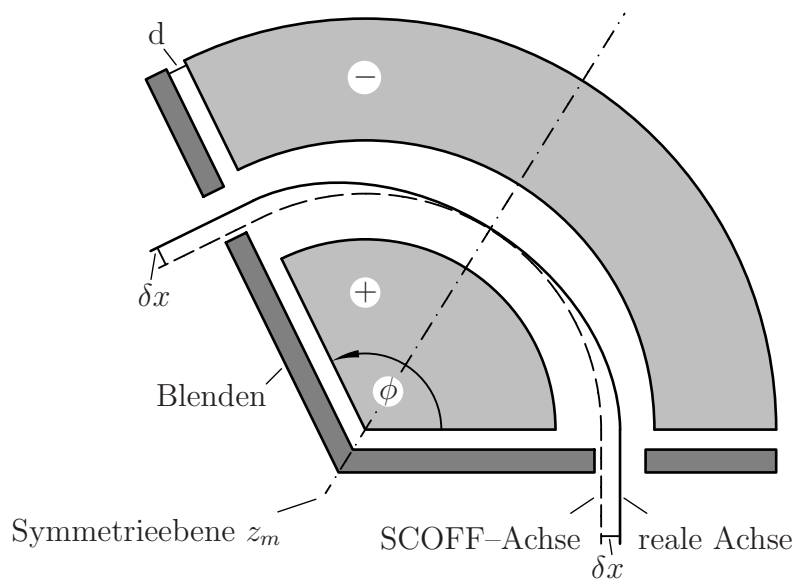


Abbildung 5.5: Optische Achse in einem Ablenker mit justierter Feldblende.



Kapitel 6

Paraxialer Strahlengang und Dispersion

6.1 Paraxiale Bahngleichungen bei Einschnittsymmetrie

Zur Beschreibung der Teilchenbewegung wird im folgenden das mit der optischen Achse mitgeführte Koordinatensystem aus Abschnitt 4.1 verwendet. Die Orientierung der Koordinatenachsen ist in der Abbildung 5.2 sowohl für den Ω -Schnitt als auch die Elektrodenquerschnitte eingezeichnet. Innerhalb des zweiten Ablenkens zeigt die x -Achse vom Krümmungsmittelpunkt der Bahn weg. Diese von der in Abschnitt 4.1 eingeführten Konvention abweichende Orientierung ist notwendig, um einen stetigen Übergang des Koordinatensystems vom ersten zum zweiten Ablenker zu gewährleisten. Auch im mitbewegten Koordinatensystem fällt der xz -Schnitt stets mit dem horizontalen Ω -Schnitt zusammen.

Aufgrund der niedrigen Elektronenenergien von einigen Kilovolt kann nichtrelativistisch gerechnet werden. Mit Hilfe der Substitutionen

$$\Phi^* \rightarrow \Phi \quad , \quad \Lambda \rightarrow 1 \quad (6.1)$$

erhält man aus der in Kapitel 4 entwickelten relativistisch korrekten Theorie den nichtrelativistischen Spezialfall. Für die paraxiale Bahngleichung (4.81) ergibt sich

$$w'' + \frac{\Phi'}{2\Phi} w' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} + \frac{\Phi_1^2}{4\Phi^2} \right\} w + \left\{ \frac{3}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} - \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} \bar{w} = 0 \quad . \quad (6.2)$$

Hierbei ist berücksichtigt, daß aufgrund der Einschnittsymmetrie sowohl das Dipolmoment Φ_1 als auch das Quadrupolmoment Φ_2 reell sind.

Geht man mit Hilfe von (4.16) zur reellen Schreibweise über, so ergeben sich zwei voneinander entkoppelte Bahngleichungen für den xz - und den yz -Schnitt:

$$\begin{aligned} x'' + \frac{\Phi'}{2\Phi}x' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} + \frac{5}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} - \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} x &= 0, \\ y'' + \frac{\Phi'}{2\Phi}y' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} - \frac{1}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} + \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} y &= 0. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Für jeden Schnitt existieren somit zwei linear unabhängige Fundamentallösungen x_α und x_γ beziehungsweise y_β und y_δ . Hierbei bestehen die Beziehungen

$$w_\alpha := x_\alpha, \quad w_\gamma := x_\gamma, \quad w_\beta := iy_\beta, \quad w_\delta := iy_\delta \quad (6.4)$$

zwischen den komplexen und den reellen Fundamentallösungen. Die Entkoppelung der Schnitte ist vorteilhaft für die Formulierung der Bedingungen für den astigmatischen Strahlengang.

Für die dispersive Bahn (4.121) erhält man

$$w_\kappa = x_\kappa = -x_\alpha \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{U}{\Phi}} \frac{\Phi_1}{2\Phi} x_\gamma d\tilde{z} + x_\gamma \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{U}{\Phi}} \frac{\Phi_1}{2\Phi} x_\alpha d\tilde{z}. \quad (6.5)$$

Die dispersive Bahn x_κ verläuft dabei vollständig im xz -Schnitt. Hierbei wurde ein Fundamentalbahnansatz vorausgesetzt, der die Bedingungen (4.94) an die Helmholtzkonstanten erfüllt.

Zur Formulierung der elektronenoptischen Bedingungen ist es sinnvoll, auch die Fundamentalbahnen symmetrisch oder antisymmetrisch zur Ω -Symmetrieebene z_s zu wählen.

6.2 Dispersive Bahn und Filterebene

Vor der Eingangsebene z_e des Monochromators entspricht die dispersive Bahn der optischen Achse, da dort keinerlei Dipolfelder auftreten. Da der Monochromator insgesamt dispersionsfrei sein soll, muß die dispersive Bahn auch hinter der Ausgangsebene z_a wieder mit der optischen Achse übereinstimmen. Dies bedeutet, daß in der Ausgangsebene sowohl die dispersive Bahn selbst wie auch ihre erste Ableitung verschwinden müssen. Da der Monochromator in der Symmetrieebene z_s eine möglichst große Dispersion aufweisen soll, ist dies nur durch eine

bezüglich der Symmetrieebene *symmetrische* dispersive Bahn zu erfüllen. Dies ist gleichbedeutend mit der Forderung

$$x_{\kappa}'(z_s) = 0 \quad , \quad x_{\kappa}(z_s) \neq 0 \quad . \quad (6.6)$$

Der geforderte qualitative Verlauf der dispersiven Bahn ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Die optische Achse wurde hierbei zur besseren Übersicht abgewickelt.

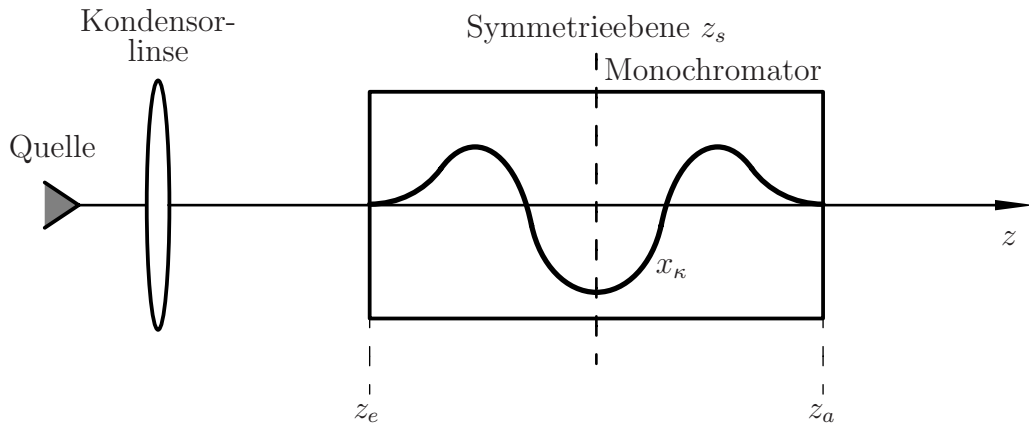


Abbildung 6.1: Verlauf der dispersiven Bahn.

6.3 Virtuelle stigmatiscche Abbildung mit astigmatischem Strahlengang

Der Monochromator soll ein Zwischenbild der Quelle mit der Vergrößerung Eins abbilden. Da außerdem zur Minimierung des Boersch-Effekts das stigmatiscche Eintrittsquellbild *virtuell* sein soll, muß die Ebene z_i des Eintrittsquellbildes *innerhalb* des Monochromators liegen. Die Kondensorlinse bildet die Quelle dabei in eine Ebene mit dem Abstand L *hinter* der Eingangsebene z_e ab, die aber vom realen Strahl aufgrund der Ablenkfelder des Monochromators nie erreicht wird. Die Nullstellen der axialen Bahnen legen nach Abschnitt 4.4.2 die Positionen der Zwischenbilder fest. Die Bahnen x_{α} und y_{β} verlaufen daher vor Eingangsebene so, daß ihre asymptotischen Fortsetzungen beide die Mikroskopachse im Abstand L hinter der Eingangsebene schneiden. Dies ist in Abbildung 6.2 skizziert.

Um die Energiefilterung in der Symmetrieebene z_s durchführen zu können, ist es notwendig, daß dort zumindest im xz -Schnitt ein Bild der Quelle liegt. Daher muß die Bedingung

$$x_\alpha(z_s) = 0 \quad (6.7)$$

gelten. Die x_α -Bahn verläuft somit *antisymmetrisch* bezüglich der Symmetrieebene z_s . Die gerade Rückprojektion des *hinter* dem Monochromator liegenden Abschnitts der x_α -Bahn schneidet die Mikroskopachse in einer Ebene z_f , die sich im Abstand L vor der Ausgangsebene befindet.

Um in dieser Ebene ein virtuelles *stigmatisches* Austrittsquellbild zu erhalten, muß auch die Rückprojektion der y_β -Bahn dort eine Nullstelle aufweisen. Dies ist genau dann erfüllt, wenn die y_β -Bahn bezüglich der Selektionsebene entweder antisymmetrisch oder symmetrisch verläuft. Möchte man eine stigmatische Abbildung der Quelle in die Symmetrieebene vermeiden, muß die y_β -Bahn *symmetrisch verlaufen*. Dies ist gleichbedeutend mit der Forderung

$$y_\beta'(z_s) = 0 \quad . \quad (6.8)$$

Damit ist auch $y_\beta(z_s) \neq 0$ sichergestellt. Der prinzipielle Verlauf der axialen Bahnen an den Schlüsselstellen ist in Abbildung 6.2 ausschnittsweise skizziert. Aufgrund der Symmetrie der axialen Bahnen und Felder ist eine 1:1 Abbildung gewährleistet.

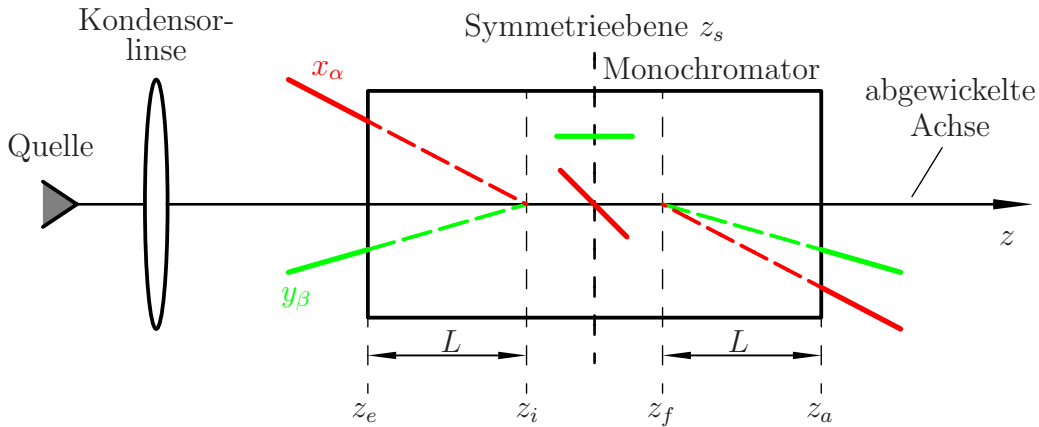


Abbildung 6.2: Verlauf der axialen Bahnen.

6.4 Runde Emissionscharakteristik der Quelle

Es ist für die weiteren Analysen sinnvoll, auch die Feldbahnen des Systems symmetrisch oder antisymmetrisch zur Symmetrieebene z_s zu wählen. Aufgrund der linearen Unabhängigkeit von axialer Bahn und Feldbahn können nicht beide in der gleichen Ebene eine Nullstelle besitzen. Da die x_α -Bahn antisymmetrisch verläuft, muß die x_γ -Bahn *symmetrisch* sein. Die y_δ -Bahn ist hingegen aufgrund des symmetrischen Verlaufs der y_β -Bahn *antisymmetrisch* (Abbildung 6.3).

Zusätzlich zur runden Gesamtabbildung des Systems ist es zweckmäßig, bei der Abbildung auch die rotationssymmetrische Strahlcharakteristik der Quelle zu erhalten. Der Strahl soll hinter der Ausgangsebene im xz -Schnitt die gleiche Raumwinkelverteilung aufweisen wie im yz -Schnitt. Ein Flächenelement der virtuellen Austrittsquelle, das auf der x -Achse in einem Abstand d vom Quellbildmittelpunkt entfernt liegt, muß dazu unter dem gleichen Winkel zur Achse emittieren wie ein Flächenelement mit Abstand d auf der y -Achse. Da der Wert der Feldbahn den Emissionsort und die Steigung der Feldbahn die mittlere Emissionsrichtung in einem Schnitt angibt, ist die obige Bedingung gleichbedeutend mit der Forderung

$$\frac{x_\gamma'(z_e)}{x_\gamma(z_e)} = \frac{y_\delta'(z_e)}{y_\delta(z_e)} \quad . \quad (6.9)$$

Aufgrund der unterschiedlichen Symmetrien der Feldbahnen wird das virtuelle Eintrittsquellbild bei der Abbildung an der x -Achse gespiegelt.

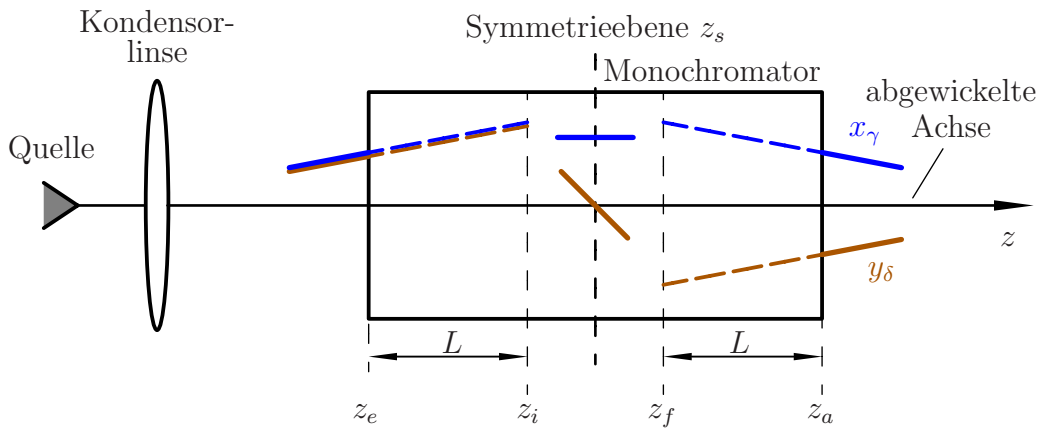


Abbildung 6.3: Verlauf der Feldbahnen.

Kapitel 7

Analytische Lösung in SCOFF–Näherung

7.1 Geometrieparameter

Der Verlauf der optischen Achse wird in SCOFF–Näherung durch die in Abbildung 7.1 eingezeichneten sechs Parameter

$$L, \quad \Delta, \quad S, \quad \phi, \quad R_1, \quad R_2 \quad (7.1)$$

eindeutig festgelegt. Hierbei wird das Vorzeichen von L so gewählt, daß das Eintrittsquellbild für ein *negatives* L virtuell ist.

Zur Berechnung der Fundamentalbahnen und zur Formulierung der elektronenoptischen Bedingungsgleichungen aus Kapitel 6 wird in den folgenden Abschnitten der normierte Parametersatz

$$l := \frac{L}{R_1}, \quad \delta := \frac{\Delta}{R_1}, \quad s := \frac{S}{R_1}, \quad r := \frac{R_2}{R_1}, \quad R := R_1, \quad \phi \quad (7.2)$$

und die normierte Bogenlänge der optischen Achse

$$\hat{z} := \frac{z}{R_1} \quad (7.3)$$

verwendet. Alle Längen– und Abstandsparameter sind auf die Länge R_1 des ersten Ablenkens normiert. Die Wahl von R_1 als Normierungslänge ist rein willkürlich.

Wie in den folgenden Abschnitten gezeigt wird, können im Rahmen der SCOFF–Näherung alle Bahnen und Bedingungsgleichungen analytisch angegeben werden.

Durch die Wahl des normierten Parametersatzes kann man unmittelbar erkennen, ob eine Größe von der Skalierung des Systems abhängt. Eine Größe ist genau dann unabhängig von der Skalierung, wenn ihr analytischer Ausdruck die Normierungslänge $R = R_1$ nicht mehr enthält.

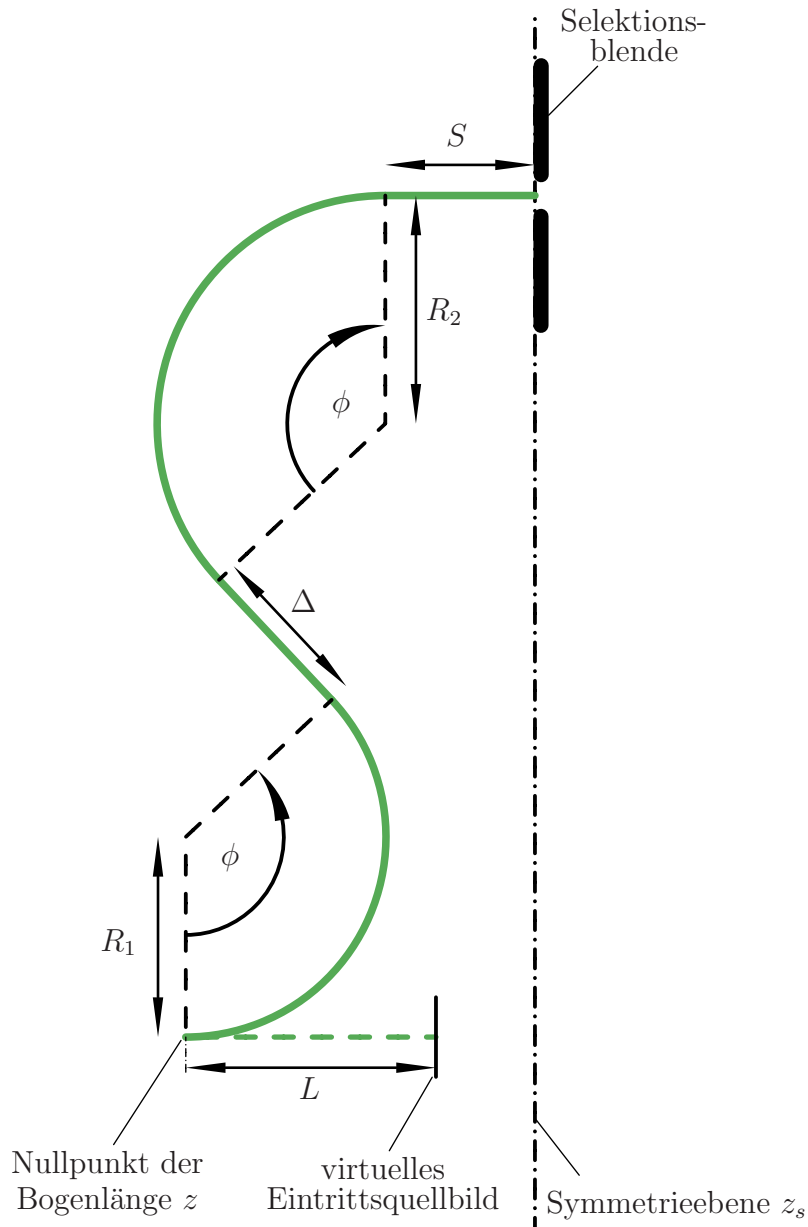


Abbildung 7.1: Geometrieparameter in SCOFF-Näherung.

Als Nullpunkt der Bogenlänge wählt man die Eintrittskante des ersten Ablenkers. Die Abschnitte zwischen den Ablenkern und innerhalb der Ablenker entsprechen den Intervallen

$$\begin{aligned}
 I_1 &:= [-l, 0] & : & \text{ vor dem ersten Ablenker} \\
 I_2 &:= [0, \phi] & : & \text{ im ersten Ablenker} \\
 I_3 &:= [\phi, \phi + \delta] & : & \text{ zwischen dem ersten} \\
 & & & \text{ und zweiten Ablenker} \\
 I_4 &:= [\phi + \delta, \delta + (1+r)\phi] & : & \text{ im zweiten Ablenker} \\
 I_5 &:= [(1+r)\phi + \delta, (1+r)\phi + \delta + s] & : & \text{ zwischen dem zweiten} \\
 & & & \text{ Ablenker und der} \\
 & & & \text{ Selektionsebene}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

entlang der abgewickelten normierten Achse.

7.2 Paraxiale Bahngleichungen

Das Potential entlang der Achse ist in der SCOFF-Näherung konstant. Sein Wert beträgt $\Phi = U$. Daher verschwinden alle Terme in der paraxialen Bahngleichung die Φ' oder Φ'' enthalten. Das Dipol- und das Quadrupolmoment sind entlang der kreisbogenförmigen Achsabschnitte in den Ablenkern konstant und außerhalb Null. Außerhalb der Ablenker reduziert sich die paraxiale Bahngleichung somit auf die Differentialgleichung für eine *Gerade*:

$$x'' = 0 \quad . \tag{7.5}$$

Die paraxialen Bahngleichungen (6.3) für den xz -Schnitt und den yz -Schnitt im ersten und zweiten Ablenker lauten

$$\begin{aligned}
 x'' + \left\{ \frac{5}{2} \frac{1}{R_i^2} - \frac{\Phi_{2,i}}{U} \right\} x &= 0 \\
 y'' + \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{R_i^2} + \frac{\Phi_{2,i}}{U} \right\} y &= 0
 \end{aligned} \quad , \quad i = 1, 2 \quad . \tag{7.6}$$

Hierbei wurden die Dipolstärken mit Hilfe der Beziehung (5.2) durch die Radien R_1 und R_2 der optischen Achse im ersten beziehungsweise zweiten Ablenker ersetzt.

Ist in der paraxialen Bahngleichung für einen Schnitt der Koeffizient von x oder y positiv, so erhält man sinus- beziehungsweise cosinusförmige Bahnen als Fundamentallösungen. Das Element wirkt somit in diesem Schnitt fokussierend. Im Falle

eines negativen Koeffizienten defokussiert das Element, da die Lösungen dann Linearkombinationen von sinus-hyperbolicus- und cosinus-hyperbolicus-förmigen Bahnen sind.

Ein Ablenkelement, daß nur ein Dipol- aber kein Quadrupolmoment erzeugt, fokussiert im xz -Schnitt und defokussiert im yz -Schnitt. Um einen möglichst achsnahen Strahlengang zu gewährleisten, ist es sinnvoll, das Quadrupolmoment so zu wählen, daß beide Ablenkelemente in beiden Schnitten fokussieren. Hieraus ergeben sich die Bedingungen

$$\frac{1}{2} \frac{1}{R_i^2} < \frac{\Phi_{2,i}}{U} < \frac{5}{2} \frac{1}{R_i^2} \quad , \quad i = 1, 2 \quad (7.7)$$

für die Quadrupolmomente $\Phi_{2,i}$, $i = 1, 2$ im ersten und im zweiten Ablenker.

Für die dispersive Bahn (6.5) erhält man in SCOFF-Näherung

$$w_\kappa = x_\kappa = -x_\alpha \int_{z_e}^z f(\tilde{z}) x_\gamma d\tilde{z} + x_\gamma \int_{z_e}^z f(\tilde{z}) x_\alpha d\tilde{z} \quad (7.8)$$

mit dem Integranden

$$f(z) = \begin{cases} 0 & : \text{außerhalb der Ablenker} \\ \frac{1}{R_1} & : \text{im ersten Ablenker} \\ -\frac{1}{R_2} & : \text{im zweiten Ablenker} \end{cases} . \quad (7.9)$$

Das negative Vorzeichen im zweiten Ablenker rührt daher, daß das Dipolmoment bei der in Abschnitt 6.1 gewählten Orientierung des mitgeführten Koordinatensystems im zweiten Ablenker negativ ist. Die Radien der Ablenker sind dagegen stets positive Größen.

Führt man die normierten Parameter (7.2) ein, so müssen die paraxialen Bahngleichungen auf Ableitungen bezüglich \hat{z} umgeschrieben werden. Hierbei ist es zweckmäßig, auch die Bahnparameter $\alpha, \gamma, \beta, \delta$ und κ sowie die zugehörigen Fundamentalbahnen geeignet zu normieren.

Bei der Linearkombination (4.82) einer Lösung aus den Fundamentalbahnen geben die Vorfaktoren der axialen Bahnen α und β die *Startwinkel* an. Diese sind invariant gegenüber einer Skalierung des Systems. Die Vorfaktoren γ und δ der Feldbahnen hingegen haben die Dimension einer Länge, da sie den *Startabstand* von der Achse festlegen. Sie skalieren somit mit der Größe des Systems. Die Bahnparameter werden deshalb unterschiedlich normiert:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha} &:= \alpha \quad , & \hat{\beta} &:= \beta \quad , \\ \hat{\gamma} &:= \frac{\gamma}{R} \quad , & \hat{\delta} &:= \frac{\delta}{R} \quad . \end{aligned} \quad (7.10)$$

Jede aus den Fundamentalbahnen durch Linearkombination bestimmte Gaußsche Bahn weist die Dimension einer Länge auf und skaliert deshalb ebenfalls mit der Größe des Systems. Um dies bei der gewählten Normierung (7.10) der Bahnparameter zu gewährleisten, müssen die Feldbahnen dimensionslos sein und die axialen Bahnen die Dimension einer Länge aufweisen. Die Fundamentalbahnen normiert man deshalb wie folgt:

$$\begin{aligned}\hat{x}_{\hat{\alpha}}(\hat{z}) &:= \frac{x_{\alpha}(\hat{z}R)}{R} \quad , \quad \hat{y}_{\hat{\beta}}(\hat{z}) := \frac{y_{\beta}(\hat{z}R)}{R} \quad , \\ \hat{x}_{\hat{\gamma}}(\hat{z}) &:= x_{\gamma}(\hat{z}R) \quad , \quad \hat{y}_{\hat{\delta}}(\hat{z}) := y_{\delta}(\hat{z}R) \quad .\end{aligned}\tag{7.11}$$

Für die Ableitungen der normierten Bahnen werden im folgenden die Abkürzungen

$$\begin{aligned}\hat{x}'_{\mu} &:= \frac{d\hat{x}_{\mu}}{d\hat{z}} \quad , \quad \mu = \hat{\alpha}, \hat{\beta} \quad , \\ \hat{y}'_{\nu} &:= \frac{d\hat{y}_{\nu}}{d\hat{z}} \quad , \quad \nu = \hat{\gamma}, \hat{\delta}\end{aligned}\tag{7.12}$$

verwendet. Die Normierung erhält die Helmholtzkonstante, so daß die Voraussetzung (4.94) für die Gültigkeit der Dispersionsformel (7.8) auch für die normierten Bahnen erfüllt ist.

Mit den Definitionen

$$\begin{aligned}\mu_1^2 &:= \frac{5}{2} - \frac{\Phi_{2,1}}{U} R_1^2 \quad , \quad \nu_1^2 := -\frac{1}{2} + \frac{\Phi_{2,1}}{U} R_1^2 \\ \mu_2^2 &:= \frac{5}{2} - \frac{\Phi_{2,2}}{U} R_2^2 \quad , \quad \nu_2^2 := -\frac{1}{2} + \frac{\Phi_{2,2}}{U} R_2^2\end{aligned}\tag{7.13}$$

lauten die paraxialen Bahngleichungen im ersten und zweiten Ablenker

$$\hat{x}'' + \mu_1^2 \hat{x} = 0 \quad , \quad \hat{y}'' + \nu_1^2 \hat{y} = 0 \quad ,\tag{7.14}$$

$$\hat{x}'' + \left(\frac{\mu_2}{r}\right)^2 \hat{x} = 0 \quad , \quad \hat{y}'' + \left(\frac{\nu_2}{r}\right)^2 \hat{y} = 0 \quad .\tag{7.15}$$

Hierbei wird für die Quadrupolstärken die Gültigkeit der Bedingungen (7.7) vorausgesetzt.

Die Koeffizienten μ_1 und μ_2 werden als Brechkkräfte im xy -Schnitt und ν_1 und ν_2 als Brechkkräfte im yz -Schnitt bezeichnet. Die Brechkkräfte erfüllen die Beziehungen

$$\mu_1^2 + \nu_1^2 = 2 \quad , \quad \mu_2^2 + \nu_2^2 = 2 \quad ,\tag{7.16}$$

so daß die Angabe der Brechkraft in einem Schnitt ausreicht, um die Abbildungseigenschaften eines Ablenkens in SCOFF-Näherung vollständig zu beschreiben.

Die allgemeinen Lösungen für den xz - und den yz -Schnitt lauten innerhalb des ersten Ablenkers

$$\begin{aligned}\hat{x}_1 &= a_1 \sin(\mu_1 \hat{z}) + b_1 \cos(\mu_1 \hat{z}) \\ \hat{y}_1 &= c_1 \sin(\nu_1 \hat{z}) + d_1 \cos(\nu_1 \hat{z})\end{aligned}, \quad a_1, b_1, c_1, d_1 \in \mathbb{R} \quad (7.17)$$

und innerhalb des zweiten Ablenkers

$$\begin{aligned}\hat{x}_2 &= a_2 \sin\left(\frac{\mu_2}{r} \hat{z}\right) + b_2 \cos\left(\frac{\mu_2}{r} \hat{z}\right) \\ \hat{y}_2 &= c_2 \sin\left(\frac{\nu_2}{r} \hat{z}\right) + d_2 \cos\left(\frac{\nu_2}{r} \hat{z}\right)\end{aligned}, \quad a_2, b_2, c_2, d_2 \in \mathbb{R} \quad (7.18)$$

Der Ausdruck für die normierte dispersive Bahn

$$\hat{x}_\kappa(\hat{z}) := \frac{x_\kappa(\hat{z}R)}{R} \quad (7.19)$$

lautet

$$\hat{x}_\kappa = -\hat{x}_\alpha \int_{\hat{z}_e}^{\hat{z}} \hat{f}(\tilde{z}) \hat{x}_\gamma d\tilde{z} + \hat{x}_\gamma \int_{\hat{z}_e}^{\hat{z}} f(\tilde{z}) \hat{x}_\alpha d\tilde{z} \quad (7.20)$$

mit dem Integranden

$$\hat{f}(\hat{z}) = \begin{cases} 0 & : \text{außerhalb der Ablenker} \\ 1 & : \text{im ersten Ablenker} \\ -\frac{1}{r} & : \text{im zweiten Ablenker} \end{cases} \quad (7.21)$$

7.3 Fundamentalbahnen und dispersive Bahn

Aus den Lösungen der paraxialen Bahngleichungen für die Einzelabschnitte lassen sich die Gesamtlösungen von der Eingangs- bis zur Symmetrieebene z_s stückweise zusammensetzen. An den Ablenkerkanten müssen die Lösungen stetig differenzierbar ineinander übergehen. Dann ist gewährleistet, daß die zweiten Ableitungen der Lösungen an den \hat{z} -Positionen der Ablenkerkanten nur endliche Sprünge aber keine Pole in Form einer Delta-Distribution aufweisen.

Die axialen Bahnen werden so konstruiert, daß sie in der Ebene z_i des Eintrittsquellbildes im Abstand l vor der Eintrittskante des ersten Ablenkers die Achse schneiden (siehe Abschnitt 6.3). Ein negatives l bedeutet ein virtuelles Eintrittsquellbild. Beide Bahnen werden so normiert, daß sie in der Ebene z_i die Steigung Eins besitzen.

Wie in Abschnitt 6.4 gefordert, werden die Feldbahnen symmetrisch beziehungsweise antisymmetrisch zur Symmetrieebene z_s gewählt. In der Ebene des Eintrittsquellbildes werden beide Bahnen auf den Wert 1 normiert. Mit diesen Bahnen ergeben sich die Helmholtzkonstanten (4.94). Diese sind Voraussetzung für die Gültigkeit der Dispersionsformel (7.20).

Die analytischen Ausdrücke für alle Fundamentalbahnen und die dispersive Bahn sind in Anhang A angegeben.

7.4 Bedingungsgleichungen

Da die Fundamentalbahnen in der SCOFF-Näherung analytisch gegeben sind, lassen sich auch die vier Bedingungen (6.6), (6.7), (6.8) und (6.9) analytisch darstellen. Mit den Abkürzungen (A.3) und (A.5) erhält man die Gleichungen:

$$1. \hat{x}'_{\kappa}(\hat{z}_s) = 0 :$$

$$\left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{\mu_1 r}{\mu_2^2} \right) \sin(\mu_2 \phi) - \frac{r}{\mu_2} M_{12} - \frac{1}{\mu_1} M_{21} + \delta M_s = 0 \quad (7.22)$$

$$2. \hat{y}'_{\beta}(\hat{z}_s) = 0 :$$

$$-(\delta + l) \frac{\nu_2}{r} N_{21} + \left(l \delta \nu_1 \frac{\nu_2}{r} - \frac{\nu_2}{\nu_1 r} \right) N_s + N_c - l \nu_1 N_{12} = 0 \quad (7.23)$$

$$3. \hat{x}'_{\alpha}(\hat{z}_s) = 0 :$$

$$\begin{aligned} & (l + \delta + s) M_c + \left(l \delta s \mu_1 \frac{\mu_2}{r} - s \frac{\mu_2}{\mu_1 r} - l \frac{\mu_1 r}{\mu_2} \right) M_s \\ & + \left(\frac{1}{\mu_1} - l(\delta + s) \mu_1 \right) M_{12} + \left(\frac{r}{\mu_2} - s(\delta + l) \frac{\mu_2}{r} \right) M_{21} = 0 \end{aligned} \quad (7.24)$$

$$4. \hat{x}'_{\gamma}(\hat{z}_s) \hat{y}_{\delta}(\hat{z}_s) = \hat{y}'_{\delta}(\hat{z}_s) \hat{x}_{\gamma}(\hat{z}_s) :$$

$$\begin{aligned} & \left\{ N_c - s \frac{\nu_2}{r} N_{21} - \nu_1 (\delta + s) N_{12} + \left(\delta s \nu_1 \frac{\nu_2}{r} - \frac{\nu_1 r}{\nu_2} \right) N_s \right\} \\ & \times \left\{ M_c - l \mu_1 M_{12} - \frac{\mu_2}{r} (\delta + l) M_{21} + \left(\delta l \mu_1 \frac{\mu_2}{r} - \frac{\mu_2}{\mu_1 r} \right) M_s \right\} \\ = & \left\{ \left(s \frac{\nu_2}{\nu_1 r} + l \frac{\nu_1 r}{\nu_2} - l \delta s \nu_1 \frac{\nu_2}{r} \right) N_s - (s + \delta + l) N_c \right. \\ & \left. + \left(l(\delta + s) \nu_1 - \frac{1}{\nu_1} \right) N_{12} + \left(s(\delta + l) \frac{\nu_2}{r} - \frac{r}{\nu_2} \right) N_{21} \right\} \\ & \times \left\{ \mu_1 M_{12} + \frac{\mu_2}{r} M_{21} - \delta \mu_1 \frac{\mu_2}{r} M_s \right\} \end{aligned} \quad (7.25)$$

Dies sind *vier* nichtlineare Gleichungen mit *sieben* freien Parametern

$$r, l, \delta, s, \mu_1, \mu_2, \phi \quad . \quad (7.26)$$

Da keine der Gleichungen die Normierungslänge $R = R_1$ mehr enthält, ist das Problem *von der absoluten Skalierung unabhängig*. Um in vertretbarer Zeit alle

	höchste Potenz von:			
	δ	l	s	r
Bedingung 1	1	0	0	1
Bedingung 2	1	1	0	1
Bedingung 3	1	1	1	2
Bedingung 4	2	0	1	3

Tabelle 7.1: Höchste vorkommende Potenzen der normierten Längen in den Bedingungsgleichungen.

möglichen Lösungen berechnen und miteinander vergleichen zu können, ist eine analytische Auflösung des Gleichungssystems wünschenswert.

Multipliziert man die Bedingungsgleichungen aus und beseitigt durch Umformung alle Brüche, so treten in den vier Gleichungen die vier normierten Längen

$$r, l, \delta, s \quad (7.27)$$

in Polynomform auf. Die Polynomkoeffizienten bestehen aus Produkten von Sinus- und Cosinustermen, deren Argumente die Brechkräfte μ_1 und μ_2 sowie den Umlenkwinkel ϕ in unterschiedlichen Kombinationen enthalten. Am aussichtsreichsten erscheint eine Auflösung des Systems nach den vier normierten Längen. Die Brechkräfte μ_1 und μ_2 sowie der Umlenkwinkel ϕ sind in diesem Falle die freien Parameter des Systems.

In Tabelle 7.1 ist aufgetragen, mit welcher Potenz jede normierte Länge in den ausmultiplizierten Bedingungsgleichungen höchstens auftritt. Aus der ersten Bedingungsgleichung erhält man einen linearen Zusammenhang zwischen δ und r . In den übrigen Gleichungen läßt sich hiermit δ durch r ersetzen. Die so modifizierte zweite Bedingung liefert eine lineare Beziehung zwischen l und r , mit deren Hilfe man in Gleichung 3 l durch r ersetzen kann. Aus der dritten Bedingung läßt sich dann s als Polynom zweiten Grades von r schreiben. Ersetzt mit Hilfe dieser Beziehung in der vierten Gleichung s durch r , so erhält man nach längerer Rechnung für die vierte Bedingungsgleichung eine quadratische Gleichung der Form

$$A(\phi, \mu_1, \mu_2)r^2 + B(\phi, \mu_1, \mu_2)r + C(\phi, \mu_1, \mu_2) = 0 \quad , \quad (7.28)$$

Die Koeffizienten A, B und C sind Summen von Produkten aus Sinus- und Cosinusfunktionen und hängen von den Brechkräften und dem Umlenkwinkel ab.

Zu jedem Tripel $[\mu_1, \mu_2, \phi]$ existieren mathematisch zwei Lösungen für r . Für eine gegebene Lösung r sind die übrigen Parameter s, l, δ *eindeutig* bestimmt.

Sie lassen sich durch Umkehrung des oben skizzierten Weges sukzessive aus r berechnen.

7.5 Physikalische Bedingungen an die Lösungen

Damit eine Lösung überhaupt physikalisch sinnvoll ist, müssen die Abstände δ und s sowie das Radienverhältnis r positiv und reell sein:

$$\delta, s, r \in \mathbb{R} \quad , \quad \delta, s, r > 0 \quad . \quad (7.29)$$

Da wir eine *virtuelle* Abbildung der Quelle fordern muß l *negativ* und reell sein:

$$l \in \mathbb{R} \quad , \quad l < 0 \quad . \quad (7.30)$$

Die Oberfläche der negativen Elektrode des ersten Ablenkens darf nicht über die Symmetrieebene z_s hinausragen. Ansonsten durchdringen sich die Innenräume des ersten und des vierten Ablenkens, was physikalisch sinnlos ist. Um dies zu vermeiden muß

$$(1 + r) \sin \phi + \delta \cos \phi + s - r_{max} > 0 \quad (7.31)$$

gelten, wobei die normierte Größe r_{max} den größten auftretenden Radius der negativen Elektrode des ersten Ablenkens bezeichnet. Die Elektrodenform und damit auch r_{max} wird durch die Wahl des Potentials auf der negativen Elektrode, der Brechkraft μ_1 und der höheren Multipolmomente $\Phi_i, i > 2$ bestimmt (Abschnitt 5.3).

Im Hoch- oder Ultrahochvakuum sind in der Praxis alle Potentialgradienten bis zu 5 kV/mm problemlos beherrschbar. Potentialgradienten zwischen 5 kV/mm und 10 kV/mm stellen bereits deutlich erhöhte Anforderungen an die Reinheit und Glätte der Oberflächen sowie an das Vakuum. Aus diesem Grund dürfen bei einer maximalen Baulänge von 10 cm von der Eintrittskante des ersten bis zur Austrittskante des vierten Ablenkens nirgends Potentialgradienten über 5 kV/mm auftreten.

Außerdem sollten bei einer maximalen Baulänge von 10 cm die Abstände δ und s zwischen den Ablenkern beziehungsweise zwischen dem zweiten Ablenker und der Selektionsblende möglichst groß sein, damit genügend Platz für die Feldblenden vor und hinter den Ablenkern bleibt.

Um die Anzahl der benötigten Spannungsquellen in vertretbaren Grenzen zu halten, ist es wünschenswert, für alle negativen und alle positiven Elektroden

jeweils die gleiche Spannung gegen Erde zu verwenden. Diese Wahl ist auch aus Gründen der Betriebsstabilität günstig, da dann die Spannungen für die verschiedenen Ablenker nicht gegeneinander schwanken können. Fordert man konstante Elektrodenpotentiale, so skaliert die Dimension eines Ablenkers linear mit dem geforderten Radius R der Bahnkurve. Aus bautechnischen Gründen sollten die Größen der Ablenker nicht zu stark voneinander abweichen. Daher sind Lösungen vorzuziehen, für die das Radienverhältnis r möglichst nahe bei 1 liegt.

Die Dispersion in der Symmetrieebene sollte so groß sein, daß die zur Filterung notwendige Schlitzbreite keine bautechnischen Probleme bereitet. Um die notwendige Dispersion bei möglichst kleiner Baulänge zu erreichen, sollte die Dispersion in der Selektionsebene normiert auf die Baulänge des Systems sollte möglichst groß sein.

Um dem Boersch-Effekt entgegenzuwirken, sind Systeme mit möglichst wenigen Crossovern vorzuziehen. Zwei astigmatische Crossover in verschiedenen Schnitten sollten nicht zu dicht aufeinander folgen und die linienförmigen Zwischenbilder der Quelle sollten möglichst lang sein, da hierdurch die Stromdichte in den Crossovern und damit die Stoßwahrscheinlichkeit zwischen den Strahlelektronen sinkt.

7.6 Optimale analytische Näherungslösung

Durch die analytische Darstellbarkeit der Lösungen kann der komplette dreidimensionale Lösungsraum in vertretbarer Zeit nach denjenigen Lösungen durchsucht werden, die den im vorherigen Kapitel aufgestellten Kriterien genügen. Das beste gefundene SCOFF-System ist in Abbildung 7.2 gezeichnet.

Beträgt der Bahnradius im ersten Ablenker $R_1 = 28,66$ mm, so hat das System gerade eine Baulänge von 10 cm. Bei einer Beschleunigungsspannung der Elektronen von 3 kV erhält man eine Dispersion von

$$D = 21,7 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}} \quad . \quad (7.32)$$

in der Selektionsebene.

Um die Energiebreite des Strahls auf $\Delta E = 0,3$ eV zu reduzieren, ist eine Schlitzbreite von $D \cdot \Delta E = 6,47 \mu\text{m}$ notwendig. Für $\Delta E = 0,2$ eV beträgt die Schlitzbreite $4,31 \mu\text{m}$. Diese Schlitzbreiten sind problemlos realisierbar. Bei der Berechnung der Elektrodenquerschnittsflächen wurden alle Multipolmomente $\Phi_i, i > 2$ Null gesetzt. Die Fundamentalbahnen des Systems sind zusammen mit der dispersiven Bahn in Abbildung 7.3 aufgetragen.

vertikaler Querschnitt horizontaler Ω -Schnitt

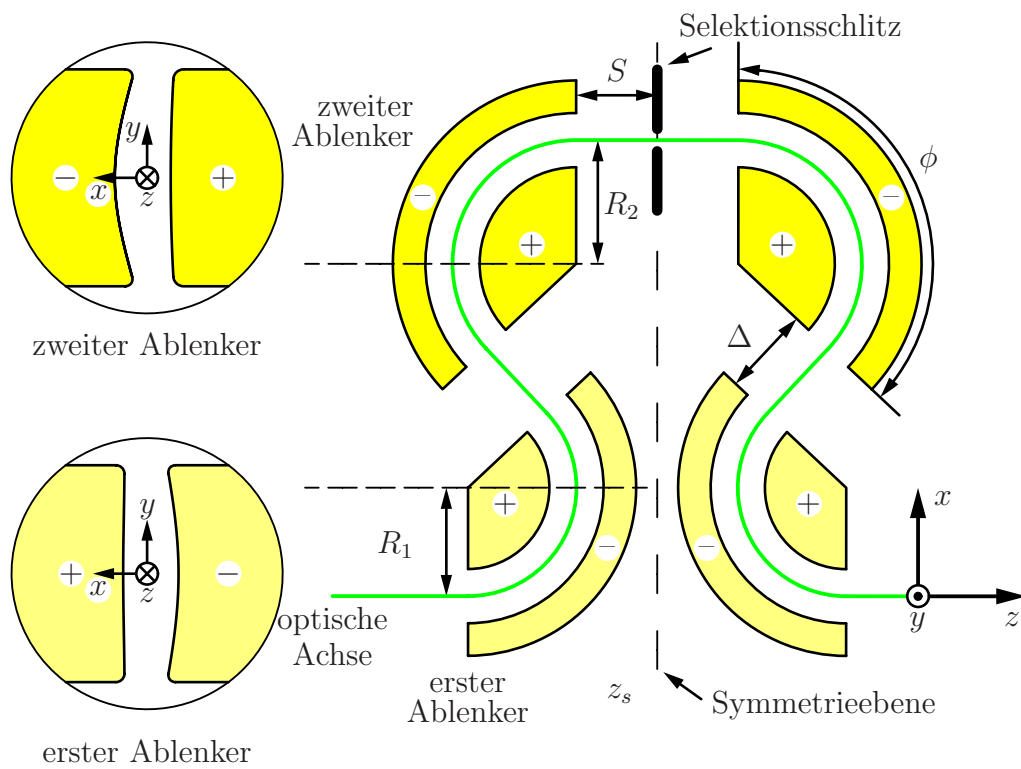


Abbildung 7.2: Optimales System in SCOFF-Näherung.

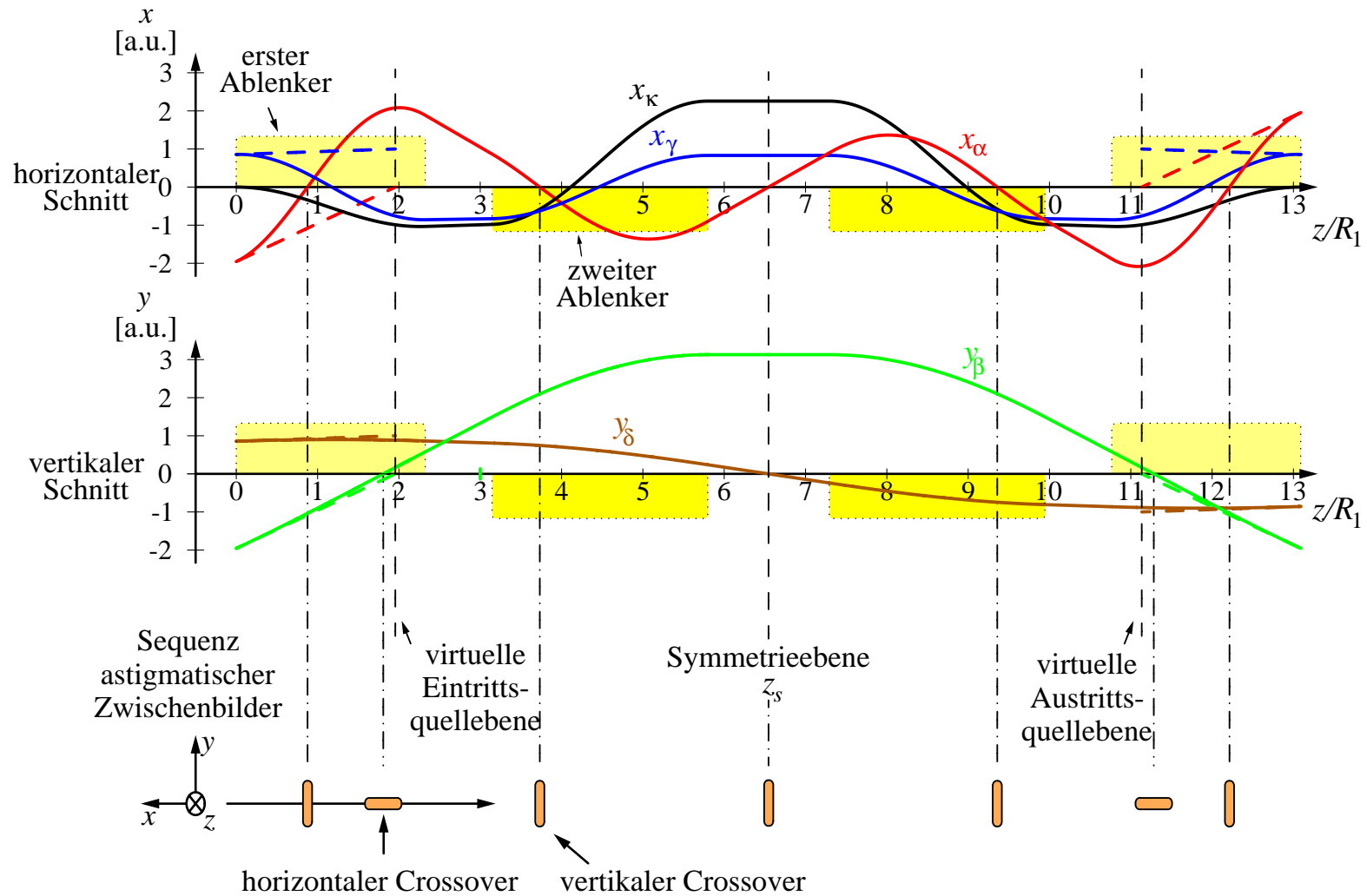


Abbildung 7.3: Fundamentalbahnen und dispersive Bahn in SCOFF-Näherung.

Kapitel 8

Semianalytische Simulation der Randfelder

8.1 Anforderungen an die Feldsimulation

Um den Einfluß der Abbildungsfehler auf die Energiefilterung in der Symmetrieebene und auf die Größe des virtuellen Austrittsquellbildes zu untersuchen, benötigt man die Fehlerbahnen (4.100) zweiter und dritter Ordnung des Systems. Mit Hilfe der Fehlerbahnen dritter Ordnung kann man kontrollieren, wie gut die Bildfehlerentwicklung im Falle des Monochromators konvergiert. Mit Hilfe der Fehlerbahnen ist es auch möglich, die Toleranzen für Fehljustierungen der Quelle und der Stromselektionsblende gegenüber dem Monochromator abzuschätzen. Fehlerbahnen höherer Ordnung sind bei den hier auftretenden Größenordnungen für den Öffnungswinkel des Bündels und die Ausdehnung der Quelle gegenüber den ersten beiden Fehlerordnungen vernachlässigbar klein.

Die Darstellung (4.69) der Funktion \tilde{f} enthält genau eine Ableitung des Potentials φ^* nach der komplexen Bahnvariablen w . Somit ist die $(r + 1)$ -te Entwicklungsordnung des Potentials die höchste Ordnung, die noch zu $\sigma^{(r)}$ (4.79) und damit auch zu $s^{(r)}$ (4.107) beiträgt. Eine Fehlerbahn r -ter Ordnung (4.100) hängt daher von allen Multipolen bis $(r + 1)$ -ter Ordnung ab.

Zur Berechnung der Fehlerbahn dritter Ordnung werden somit alle Multipolmomente bis einschließlich des Oktupols Φ_4 benötigt. Wie man mit Hilfe von (4.31) aus (4.28) erkennt, lassen sich die Multipole bezüglich einer Entwicklungsachse

aus dem Potential durch

$$\Phi_\mu = \frac{2}{n!} \frac{\partial^\mu \phi}{\partial \bar{w}^n} \Big|_{w, \bar{w}=0} \quad (8.1)$$

bestimmen. Da die Achse in der Ebene der Einschnittsymmetrie liegt, ist nur der Realteil von Φ_ν von Null verschieden. Schreibt man (8.1) auf Ableitungen nach x und y um, so erhält man die Beziehungen

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \partial_x \varphi \Big|_{(x,y)=0} , \\ \Phi_2 &= \frac{1}{4} (\partial_x^2 - \partial_y^2) \varphi \Big|_{(x,y)=0} , \\ \Phi_3 &= \frac{1}{24} (\partial_x^3 - 3\partial_x \partial_y^2) \varphi \Big|_{(x,y)=0} , \\ \Phi_4 &= \frac{1}{192} (\partial_x^4 - 6\partial_x^2 \partial_y^2 + \partial_y^4) \varphi \Big|_{(x,y)=0} . \end{aligned} \quad (8.2)$$

Zur Berechnung der Bildfehler dritter Ordnung benötigt man somit alle partiellen Ableitungen nach x und y bis zur vierten Ordnung einschließlich.

Verwendet man eine auf finiter Integration oder finiten Elementen basierende Methode zur Feldsimulation, so erhält man nur Werte für das Potential an diskreten Gitterpunkten. Um alle partiellen Ableitungen bis vierter Ordnung zu bestimmen, muß man viermal sukzessiv numerisch differenzieren. Der numerische Fehler wächst dabei mit jedem Differentiationsschritt an, da die zur Ableitung benötigten Werte zwischen den Gitterpunkten interpoliert werden müssen. Um auch noch für die vierten Ableitungen hinreichend kleine relative Fehler von einigen Prozent zu garantieren, muß das Raumgitter so extrem fein gewählt werden, daß die benötigte Rechenzeit drastisch anwächst.

Für die gegebene Problemstellung ist das Verfahren der Ladungssimulation besser geeignet, da es eine analytische Lösung für das Feld im Raum liefert. Die Laplace-Gleichung ist exakt erfüllt, die Randbedingungen jedoch nur näherungsweise. Durch Differentiation der Ausdrücke für das Potential lassen sich alle benötigten Ableitungen auf der Achse – also weit weg von den Rändern – mit hoher Genauigkeit berechnen.

8.2 Ersatzladungsverfahren

Gibt man sich die Potentiale U_i auf den Oberflächen der Elektroden E_i vor, ist die Lösung der Laplace-Gleichung im Vakuum zwischen den Elektroden eindeutig

bestimmt. Hierbei ist unwichtig, ob das Feld durch die realistische Ladungsdichteverteilung auf den Elektrodenoberflächen oder durch eine andere, *ersatzweise* angenommene räumliche Ladungsverteilung erzeugt wird, solange seine Äquipotentialflächen $\varphi = U_i$ mit den Oberflächen der Elektroden E_i übereinstimmen. Die Ersatzladungsverteilung muß im Inneren der Elektroden liegen, da nach Voraussetzung das Vakuum außerhalb der Elektroden ladungsfrei ist.

Beim Ersatzladungsverfahren wird eine Näherungslösung für das Potential im Raum aus den Potentialen $\varphi_i(\vec{r})$ einer *diskreten Anzahl* N einzelner Ladungselemente konstruiert

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N q_i \varphi_i(\vec{r}) \quad , \quad (8.3)$$

die im Inneren der Elektroden liegen. Falls das Potential an der Position der Ladungselemente keinen Pol aufweist, können sich die Elemente auch unmittelbar auf den Elektrodenflächen befinden. Die Stärke q_i jedes Elements kann zunächst frei gewählt werden. Es werden nur solche Ladungselemente verwendet, deren Potentialverteilung analytisch darstellbar ist. Häufig verwendete Elemente sind beispielsweise Punktladungen oder – im rotationssymmetrischen Fall – ringförmige Ladungen.

Ziel ist es, die Stärke jedes Elements so zu wählen, daß die Elektrodenoberflächen durch die Äquipotentialflächen von (8.3) möglichst gut approximiert werden. Hierzu gibt man sich so viele Kontrollpunkte \vec{r}_j auf den Elektrodenoberflächen vor, wie Ersatzladungen existieren. In den Kontrollpunkten fordert man, daß das Potential gleich der an die jeweilige Elektrode angelegten Spannung ist. Dies ist eine Spezialisierung des allgemeineren Falls, bei der man in jedem Kontrollpunkt \vec{r}_j einen unterschiedlichen Wert φ_j für das Potential fordert:

$$\varphi_j = \sum_{i=1}^N q_i \varphi_i(\vec{r}_j) \quad , \quad j = 1, \dots, N \quad . \quad (8.4)$$

Hiermit ist das Problem auf ein lineares $N \times N$ Gleichungssystem zurückgeführt.

Wie gut die Approximation des Potentials ist, hängt in erster Linie von der geschickten Positionierung der Ersatzladungen im Elektrodeninneren ab. Um im Falle von Punktladungen und Ringladungen eine hinreichend genaue Approximation des Potentials auf der Elektrodenoberfläche zu erreichen, darf der Abstand der Ersatzladungen höchstens von derselben Größenordnung sein wie der Abstand einer Ersatzladung von der Elektrodenoberfläche. Bei sinnvoller Wahl der Ersatzladungspositionen ist die Matrix $A_{ij} = \varphi_i(\vec{r}_j)$ gut konditioniert. Deshalb reicht selbst bei einigen tausend Ladungen der Gauß-Algorithmus mit Pivotisierung zur Lösung des Gleichungssystems aus.

Bereits bei rotationssymmetrischen Systemen wie dem elektrostatischen Diodenspiegel in [58] werden zirka 3000 Ringladungen zur hinreichend genauen Feldsimulation benötigt. Die Zahl der notwendigen Punktladungen für die Simulation eines nicht rotationssymmetrischen Objekts liegt nochmals deutlich über diesem Wert. Besonders zur Simulation der Ein- und Austrittsblenden ist eine große Anzahl von Punktladungen notwendig, da aufgrund der geringen Dicke der Blenden (einige Millimeter) die Punktladungen nur einen geringen Abstand zur Blendenoberfläche aufweisen dürfen. Infolgedessen müssen sie sehr dicht gewählt werden.

8.3 Lineare Approximation der Flächenladungsdichte

Um die Anzahl der notwendigen Ladungselemente zu reduzieren, wurde für die Feldsimulation der Ablenker ein modifiziertes Verfahren verwendet. Die Oberflächen der Elektroden, der Feldblenden und der Abschirmungen werden durch ein Netz aus Dreiecken approximiert. Die Flächenladungsdichte wird durch eine an den Kanten der Dreiecke stetige und über die Dreiecksflächen lineare Ladungsverteilung angenähert (Abbildung 8.1). Es sind wesentlich weniger Dreiecke als Punktladungen notwendig, um das Potential ebener oder schwach gekrümmter Oberflächenbereiche mit nur langsam variierender Ladungsdichte zu simulieren. Dies gilt insbesondere für dünne Blenden, da in diesem Fall die Punktladungen besonders dicht gewählt werden müssen (siehe auf dieser Seite oben).

An die Stelle der Ladungsstärke eines Einzelelements treten die Werte der Flächenladungsdichte in den Vertices (Knotenpunkten) des Dreiecksnetzes. Diese bestimmen eindeutig die lineare Verteilung der Flächenladungsdichte eines Dreiecks. Wie im Verlaufe dieses Kapitels gezeigt wird, existiert ein analytischer Ausdruck für das Potential eines einzelnen Dreiecks mit linearer Ladungsverteilung.

Diese Methode der Feldsimulation wurde 1985 von Eupper [59] im Rahmen seiner Dissertation entwickelt. Allerdings wurden von Eupper nur die zur Bestimmung des elektrischen Feldes notwendigen ersten Ableitungen angegeben, so daß die sukzessive Berechnung der Fehlerbahnen zweiter und dritter Ordnung allein mit diesen Ergebnissen nicht möglich ist.

Das Potential im Raum läßt sich bei Kenntnis der relativen Flächenladungsdichten σ_i in Einheiten einer frei wählbaren Grundeinheit $\sigma^{(0)}$ in den Vertices

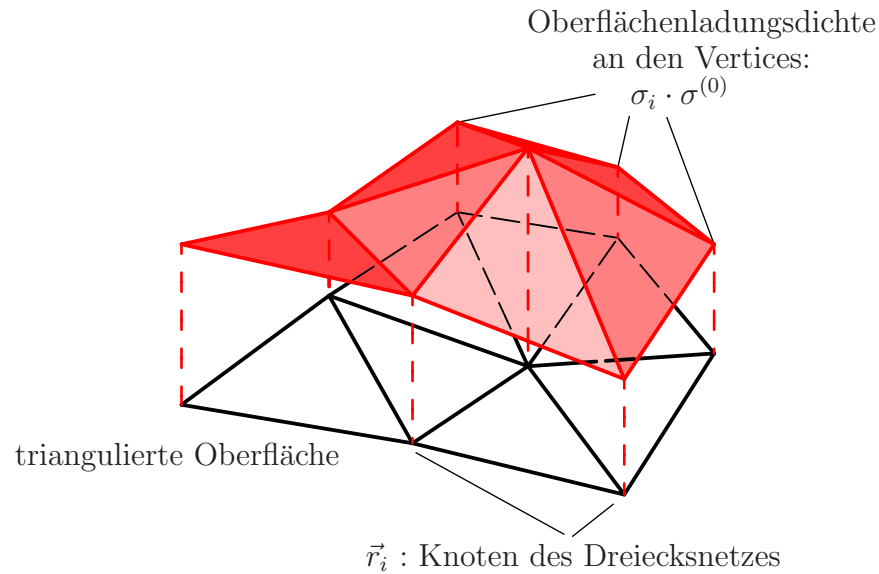


Abbildung 8.1: Lineare Approximation der Flächenladungsdichte

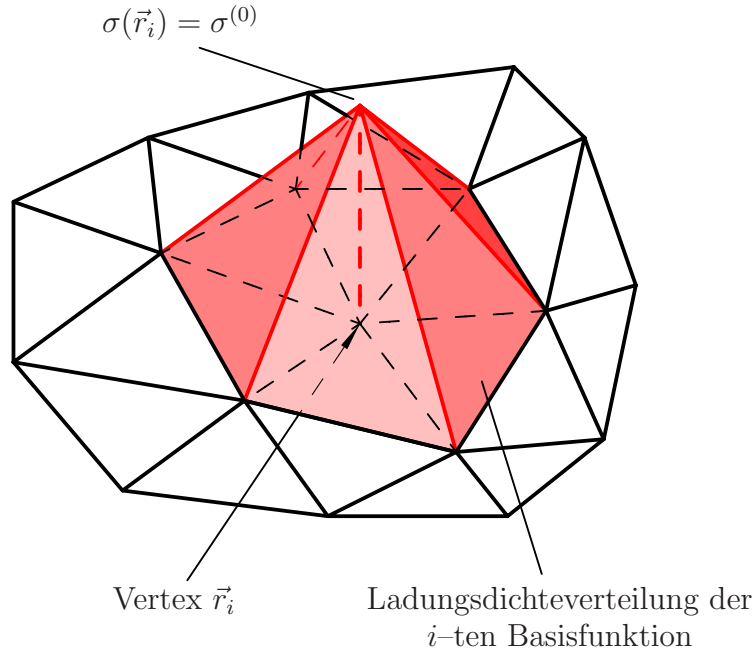
$\vec{r}_i, i = 1, \dots, N$ durch die Linearkombination

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{i=0}^N \sigma_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (8.5)$$

aus „Basisfunktionen“ $\varphi_i(\vec{r})$ berechnen. Die i -te Basisfunktion ist das Potential, daß sich ergibt, wenn die Flächenladungsdichte im Vertex \vec{r}_i den Wert $\sigma(\vec{r}_i) = \sigma^{(0)}$ annimmt und in den benachbarten sowie allen übrigen Vertices 0 C/m² beträgt. Der Verlauf der Flächenladungsdichte der i -ten Basisfunktion ist in [Abbildung 8.2](#) skizziert.

Die i -te Basisfunktion ist die Summe der Potentiale aller Dreiecke, die den Vertex \vec{r}_i als Eckpunkt besitzen (siehe [Abbildung 8.2](#)). Die Flächenladungsdichte eines solchen Dreiecks beträgt im Eckpunkt \vec{r}_i gerade $\sigma^{(0)}$ und in den übrigen Eckpunkten 0 C/m². Über die Dreiecksfläche verläuft die Ladungsdichte linear. Ein Dreieck mit einer solchen Ladungsverteilung wird als Elementardreieck bezeichnet. Sein Potential ist analytisch angebar ([Abschnitt 8.4](#)).

Als Kontrollpunkte für das Potential kann man die Vertices \vec{r}_i selbst wählen, da das Potential in den Dreiecksecken endlich und wohldefiniert ist. Die Werte σ_i der relativen Flächenladungsdichten lassen sich dann aus dem linearen $N \times N$

Abbildung 8.2: Flächenladungsdichte der i -ten Basisfunktion.

Gleichungssystem

$$\varphi_j = \sum_{i=1}^N \sigma_i \varphi_i(\vec{r}_j) \quad , \quad j = 1, \dots, N \quad (8.6)$$

bestimmen, wenn man die Potentialwerte φ_j in den Vertices vorgibt.

8.4 Potential eines Elementardreiecks

Die Eckpunkte des Dreiecks seien bezüglich des Laborsystems durch die drei Koordinatenvektoren \vec{r}_1 , \vec{r}_2 und \vec{r}_3 gegeben (Abbildung 8.3). Die Vektoren

$$\vec{r}_{ij} := \vec{r}_j - \vec{r}_i \quad , \quad i \neq j \quad , \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (8.7)$$

sind die Verbindungsvektoren zwischen den Eckpunkten. Für die Flächenladungsdichten in den Ecken wählt man

$$\sigma_1 = 0 \quad , \quad \sigma_2 = 0 \quad \text{und} \quad \sigma_3 = \sigma^{(0)} \quad . \quad (8.8)$$

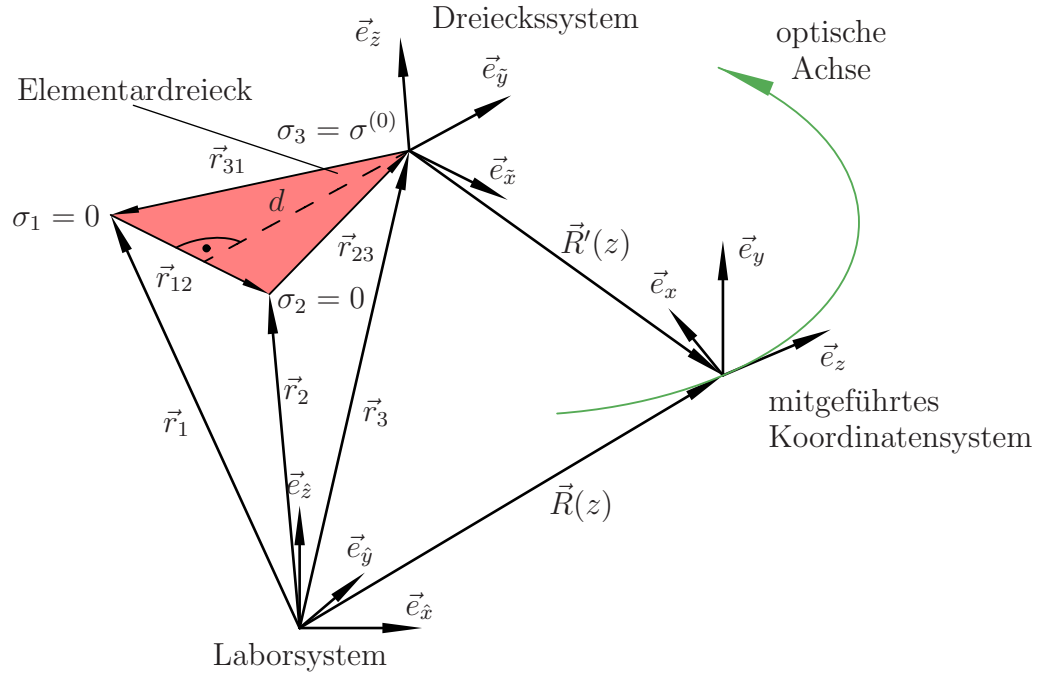


Abbildung 8.3: Wahl der Koordinatensysteme zur Berechnung des Potentials eines Elementardreiecks.

Das Potential des Dreiecks lässt sich besonders einfach in dem in Abbildung 8.3 eingezeichneten Dreieckssystem $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ beschreiben. Koordinatenangaben im Dreieckssystem werden mit einer Tilde kenntlich gemacht. Der Ursprung dieses Systems fällt mit dem Eckpunkt \vec{r}_3 zusammen. Die Basisvektoren \vec{e}_x und \vec{e}_y liegen innerhalb der Ebene des Dreiecks, der Basisvektor \vec{e}_z steht senkrecht auf der Dreiecksebene. Der Vektor \vec{e}_x ist parallel zum Verbindungsvektor \vec{r}_{12} , der Vektor \vec{e}_y steht senkrecht dazu. Die Basisvektoren lassen sich aus den Verbindungsvektoren berechnen:

$$\vec{e}_x = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad , \quad \vec{e}_y = \frac{\vec{r}_{13} - (\vec{e}_{13} \cdot \vec{e}_x) \vec{e}_x}{\sqrt{r_{13}^2 - (\vec{e}_{13} \cdot \vec{e}_x)^2}} \quad , \quad \vec{e}_z = \vec{e}_x \times \vec{e}_y \quad . \quad (8.9)$$

Ein Raumpunkt mit einem Ortsvektor \vec{R} im Laborsystem wird im Dreieckssystem durch den Ortsvektor

$$\vec{\tilde{R}} = \vec{R} - \vec{r}_3 \quad (8.10)$$

beschrieben. Die Koordinaten $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ des Ortsvektors \vec{R} lauten im Dreieckssystem

$$\tilde{X} = (\vec{R} - \vec{r}_3) \vec{e}_{\tilde{x}} \quad , \quad \tilde{Y} = (\vec{R} - \vec{r}_3) \vec{e}_{\tilde{y}} \quad , \quad \tilde{Z} = (\vec{R} - \vec{r}_3) \vec{e}_{\tilde{z}} \quad . \quad (8.11)$$

Die lineare Flächenladungsdichte

$$\sigma(\tilde{x}, \tilde{y}) = \sigma(\tilde{y}) := \sigma^{(0)} \hat{\sigma}(\tilde{y}) \quad \text{mit} \quad \hat{\sigma}(\tilde{y}) = \begin{cases} 1 + \frac{\tilde{y}}{d} & : \text{innerhalb des Dreiecks} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (8.12)$$

erfüllt die Bedingungen (8.8). Hierbei bezeichnet

$$d = \vec{r}_{13} \vec{e}_{\tilde{y}} = \sqrt{r_{13}^2 - (\vec{r}_{13} \vec{e}_{\tilde{x}})^2} \quad (8.13)$$

den Abstand des Eckpunkts \vec{r}_3 von der Verbindungslinie \vec{r}_{12} . Aus der Flächenladungsdichte läßt sich das Potential $\varphi^{(\Delta)}$ im Raum durch Integration über die Dreiecksfläche A_{Δ} bestimmen:

$$\begin{aligned} \varphi^{(\Delta)} &= \frac{\sigma^{(0)}}{4\pi\epsilon_0} \int_{A_{\Delta}} \frac{\sigma(\tilde{y})}{\left| \vec{R} - (\tilde{x} \vec{e}_{\tilde{x}} + \tilde{y} \vec{e}_{\tilde{y}}) \right|} d\tilde{x} d\tilde{y} \\ &= \frac{\sigma^{(0)}}{4\pi\epsilon_0} \int_{\tilde{y}=-d}^0 \int_{\tilde{x}=\frac{\vec{r}_{13} \vec{e}_{\tilde{x}}}{d} \tilde{y}}^{\frac{\vec{r}_{23} \vec{e}_{\tilde{x}}}{d} \tilde{y}} \frac{1 + \frac{\tilde{y}}{d}}{\sqrt{(\tilde{X} - \tilde{x})^2 + (\tilde{Y} - \tilde{y})^2 + \tilde{Z}^2}} d\tilde{x} d\tilde{y} \quad . \end{aligned} \quad (8.14)$$

Dieses Integral läßt sich analytisch vollständig auswerten, wie in [59] gezeigt wurde. Das Ergebnis der Auswertung sowie eine kompakte Methode zur Berechnung aller partiellen Ableitungen des Potentials bis zur vierten Ordnung sind in Anhang B aufgeführt.

8.5 Elektrisches Feld und Multipolmomente

Um die Bahn eines Referenzelektrons durch den Ablenker berechnen zu können, benötigt man das elektrische Feld \vec{E} aller Einzeldreiecke im Laborsystem. Hierzu muß man die partiellen Ableitungen erster Ordnung im Dreieckssystem in die partiellen Ableitungen erster Ordnung im Laborsystem umrechnen. Mit Hilfe der Beziehung

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \hat{x}_i \vec{e}_{\hat{x}_i} &= \vec{r}_3 + \sum_{j=1}^3 \tilde{x}_j \vec{e}_{\tilde{x}_j} \quad \Rightarrow \quad \tilde{x}_j = \sum_{i=1}^3 \hat{x}_i (\vec{e}_{\tilde{x}_j} \vec{e}_{\hat{x}_i}) - \vec{r}_3 \vec{e}_{\tilde{x}_j} \\ &\Rightarrow \quad \frac{\partial \tilde{x}_j}{\partial \hat{x}_i} = (\vec{e}_{\tilde{x}_j} \vec{e}_{\hat{x}_i}) \end{aligned} \quad (8.15)$$

erhält man

$$E_i^{(\Delta)} := -\frac{\partial \varphi^{(\Delta)}}{\partial \hat{x}_i} = -\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \varphi^{(\Delta)}}{\partial \tilde{x}_j} (\vec{e}_{\tilde{x}_j} \vec{e}_{\hat{x}_i}) \quad , \quad i = 1, 2, 3 \quad , \quad (8.16)$$

für das elektrische Feld eines Elementardreiecks. Die Koordinaten $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ und $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ im Labor- beziehungsweise Dreieckssystem werden hier mit $\hat{x}_i, i = 1, 2, 3$ und $\tilde{x}_i, i = 1, 2, 3$ bezeichnet.

Zur Berechnung der Multipole entlang der optischen Achse müssen alle partiellen Ableitungen des Potentials bis vierter Ordnung im mitgeführten Koordinatensystem aus den partiellen Ableitungen bis vierter Ordnung im Dreieckssystem bestimmt werden. Die Umrechnung wird dadurch erschwert, daß die Basisvektoren $\vec{e}_x(z)$ und $\vec{e}_z(z)$ nicht konstant sind, sondern von der Bogenlänge z entlang der Achse abhängen. Alle partiellen Ableitungen bezüglich des mitgeführten Koordinatensystems $\vec{e}_x(z), \vec{e}_y, \vec{e}_z(z)$ an einer bestimmten Bogenlängenposition z der Achse sind für das Potential eines Elementardreiecks durch

$$\frac{\partial^n \varphi^{(\Delta)}}{\partial x_\alpha \cdots \partial x_\beta} = \sum_{i=1}^3 \cdots \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^n \varphi^{(\Delta)}}{\partial \tilde{x}_i \cdots \partial \tilde{x}_j} (\vec{e}_{x_\alpha} \vec{e}_{\tilde{x}_i}) \cdots (\vec{e}_{x_\beta} \vec{e}_{\tilde{x}_k}) \quad , \quad \alpha, \dots, \beta = 1, 2, 3 \quad (8.17)$$

mit den partiellen Ableitungen im Dreieckssystem $\vec{e}_{\tilde{x}}, \vec{e}_{\tilde{y}}, \vec{e}_{\tilde{z}}$ verknüpft. Dies läßt sich durch sukzessive Anwendung der Beziehung (8.16) zeigen, die sowohl im Laborsystem als auch bei festgehaltener Bogenlänge z im mitgeführten Koordinatensystem gilt. Die partielle Ableitung einer Funktion f nach z ist hierbei definiert als ihre Ableitung entlang des tangential an der gekrümmten Achse angehefteten Basisvektors \vec{e}_z des mitgeführten Koordinatensystems bei *festgehaltener* Bogenlänge. Dies ist *nicht* gleich der totalen Ableitung nach der Bogenlänge, da die Änderung der Basisvektoren des mitgeführten Koordinatensystems durch die Krümmung der Achse vernachlässigt wird. Aus den partiellen Ableitungen nach x und y lassen sich die Multipole mit Hilfe von (8.2) berechnen.

Zur Berechnung der Fehlerbahnen zweiter und dritter Stufe wurden mit Hilfe des Computeralgebrasystems Maple[©] die Störglieder $s^{(2)}$ und $s^{(3)}$ nach Gleichung (4.111) bestimmt. Die Störglieder hängen außer von den Multipolen $\Phi_i, i = 1, 2, 3, 4$ selbst auch von den *totalen Ableitungen*

$$\Phi', \Phi'', \Phi''', \Phi''', \Phi'_1, \Phi''_1, \Phi'_2, \Phi''_2 \quad (8.18)$$

von Φ, Φ_1 und Φ_2 nach der Bogenlänge z ab. Mit Hilfe von

$$\frac{d}{dz} \vec{e}_x(z) = -\varkappa(z) \vec{e}_z(z) \quad , \quad \frac{d}{dz} \vec{e}_y(z) = 0 \quad , \quad \frac{d}{dz} \vec{e}_z(z) = \varkappa(z) \vec{e}_x(z) \quad , \quad \varkappa = \frac{\Phi_1}{2\Phi} \quad (8.19)$$

läßt sich die Beziehung

$$\frac{d}{dz} \partial_x^l \partial_y^m \partial_z^n \varphi^{(\Delta)} = \partial_x^l \partial_y^m \partial_z^{n+1} \varphi^{(\Delta)} + n \kappa \partial_x^{l+1} \partial_y^m \partial_z^{n-1} \varphi^{(\Delta)} - l \kappa \partial_x^{l-1} \partial_y^m \partial_z^{n+1} \varphi^{(\Delta)} \quad . \quad (8.20)$$

aus (8.17) herleiten. Mit dieser Gleichung erhält man für die Ableitungen der Multipole (8.18):

$$\begin{aligned} \Phi' &= (\partial_z \varphi^{(\Delta)})|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi'' &= (\partial_z^2 + \kappa \partial_x) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi''' &= (\partial_z^3 + 3\kappa \partial_x \partial_z + \kappa' \partial_x - \kappa^2 \partial_z) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi'''' &= (\partial_z^4 + 6\kappa \partial_x \partial_z^2 + 4\kappa' \partial_x \partial_z + 3\kappa^2 \partial_x^2 \\ &\quad - 4\kappa^2 \partial_z^2 + (\kappa'' - \kappa^3) \partial_x - 3\kappa \kappa' \partial_z) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi'_1 &= (\partial_x \partial_z - \kappa \partial_z) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi''_1 &= (\partial_x \partial_z^2 + \kappa \partial_x^2 - 2\kappa \partial_z^2 - \kappa' \partial_z - \kappa^2 \partial_x) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi'_2 &= \frac{1}{4} (\partial_x^2 \partial_z - \partial_y^2 \partial_z - 2\kappa \partial_x \partial_z) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad , \\ \Phi''_2 &= \frac{1}{4} (\partial_x^2 \partial_z^2 - \partial_y^2 \partial_z^2 - 4\kappa \partial_x \partial_z^2 + \kappa \partial_x^3 \\ &\quad - \kappa \partial_x \partial_y^2 + 2\kappa^2 \partial_z^2 - 2\kappa^2 \partial_x^2 - 2\kappa' \partial_x \partial_z) \varphi^{(\Delta)}|_{(x,y)=0} \quad . \end{aligned} \quad (8.21)$$

8.6 Bestimmung der Achse und der Fundamentalbahnen

Die Differentialgleichung

$$m_0 \ddot{\vec{r}}(t) = -e \vec{E}(\vec{r}(t)) \quad (8.22)$$

für die Berechnung einer Elektronenbahn läßt sich zusammen mit den paraxialen Bahngleichungen (6.3) und der inhomogenen Differentialgleichung

$$x'' + \frac{\Phi'}{2\Phi} x' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} + \frac{5}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} - \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} x = \sigma^{(0)} = -\frac{\Phi_1}{2\Phi} \frac{U}{\Phi} \quad (8.23)$$

für die Dispersionsbahn zu dem linearen Differentialgleichungssystem erster Ordnung in der Zeit t umschreiben:

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{r}} &= \vec{v} \quad , \\
\dot{\vec{v}} &= -\frac{e}{m_0} \vec{E}(\vec{r}) \quad , \\
(\dot{z}) &= v \quad , \\
(\dot{x}_\alpha) &= vx_\alpha' \quad , \\
(\dot{x}_\alpha') &= -v \left[\frac{\Phi'}{2\Phi} x_\alpha' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} + \frac{5}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} - \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} x_\alpha \right] \quad , \\
(\dot{x}_\gamma) &= vx_\gamma' \quad , \\
(\dot{x}_\gamma') &= -v \left[\frac{\Phi'}{2\Phi} x_\gamma' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} + \frac{5}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} - \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} x_\gamma \right] \quad , \\
(\dot{x}_\kappa) &= vx_\kappa' \quad , \\
(\dot{x}_\kappa') &= -v \left[\frac{\Phi'}{2\Phi} x_\kappa' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} + \frac{5}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} - \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} x_\kappa + \frac{\Phi_1 U}{2\Phi \Phi} \right] \quad , \\
(\dot{y}_\beta) &= vy_\beta' \quad , \\
(\dot{y}_\beta') &= -v \left[\frac{\Phi'}{2\Phi} y_\beta' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} - \frac{1}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} + \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} y_\beta \right] \quad , \\
(\dot{y}_\delta) &= vy_\delta' \quad , \\
(\dot{y}_\delta') &= -v \left[\frac{\Phi'}{2\Phi} y_\delta' + \left\{ \frac{\Phi''}{4\Phi} - \frac{1}{8} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^2} + \frac{\Phi_2}{\Phi} \right\} y_\delta \right] \quad .
\end{aligned} \tag{8.24}$$

Der Ort \vec{r} und die Geschwindigkeit \vec{v} des Referenzelektrons werden im Laborsystem angegeben. Mit Hilfe von (8.5) läßt sich das elektrische Feld aus den Feldbeiträgen (8.15) der einzelnen Elementardreiecke bestimmen.

Die optische Achse des Monochromators liegt in der Ebene der Einschnittsymmetrie. Das mitgeführte Koordinatensystem ist so orientiert, daß der Basisvektor \vec{e}_y senkrecht auf der Ebene der Einschnittsymmetrie steht. Die übrigen beiden Basisvektoren des mitgeführten Koordinatensystems lauten

$$\vec{e}_z = \frac{\vec{v}}{v} \quad , \quad \vec{e}_x = \vec{e}_y \times \vec{e}_z \quad . \tag{8.25}$$

Mit Hilfe dieser Basisvektoren läßt sich der Beitrag eines Elementardreiecks zu den Multipolmomenten und ihren Ableitungen mittels (8.2), (8.17) und (8.21) berechnen. Das jeweilige Gesamtmultipolmoment ergibt sich durch Summation

$$\Phi_i = \sum_{i=1}^N \sigma_i \Phi_i^{(\Delta)} \tag{8.26}$$

aus den Einzelbeiträgen.

Zur Lösung des Differentialgleichungssystems (8.24) wurde der in [60] beschriebene Integrator achter Ordnung mit Schrittweitensteuerung von Dormand & Prince verwendet.

Kapitel 9

Bestimmung des realistischen Designs

9.1 Parameterabhängige Triangulierung der Elektroden

Jeder Ablenker ist hinsichtlich seiner Geometrie und damit auch seiner Flächenladungsdichte und Potentialverteilung symmetrisch bezüglich des xz -Schnitts (Ebene der Einschnittsymmetrie) und bezüglich der in Abbildung 5.5 eingezeichneten Symmetrieebene z_m . Deshalb genügt es, den in Abbildung 9.1 skizzierten Teilbereich zu triangulieren, da man aus ihm die übrigen drei Abschnitte durch Spiegelung erzeugen kann. Es ist zweckmäßig, beide Ablenker bei der Simulation jeweils auf

$$R = 1 \quad \text{und} \quad U = 1 \tag{9.1}$$

zu normieren. Hierbei bezeichnet R den Radius der SCOFF-Bahn. Die Achse $\vec{r}(z)$ und alle Bahnstörungen $w^{(i)}(z)$, $i > 0$ eines Ablenkers können mit Hilfe von

$$\begin{aligned} \vec{r}(\hat{z}) &:= \frac{\vec{r}(\hat{z}R)}{R} \\ \hat{w}^{(i)}(\hat{z}) &:= \frac{w^{(i)}(\hat{z}R)}{R} \quad , \quad i > 0 \end{aligned} \tag{9.2}$$

aus den Ergebnissen $\vec{r}(\hat{z})$ und $\hat{w}^{(i)}(\hat{z})$, $i > 0$ für den normierten Ablenker berechnet werden. Hierbei bedeutet $\hat{z} = z/R$ die normierte Bogenlänge. Für die Umrechnung der Fundamentalbahnen und der dispersiven Bahn gelten (7.11) und (7.19).

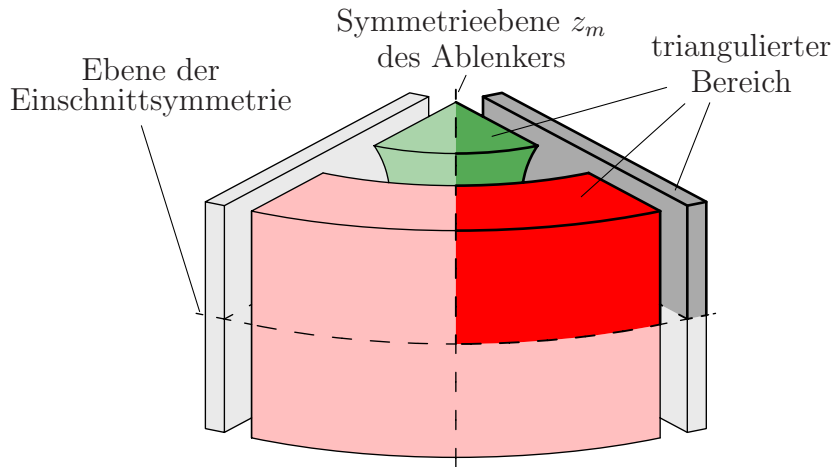


Abbildung 9.1: Triangulierter Teilbereich des Ablenkers.

Bei der numerischen Optimierung des Designs müssen verschiedene Ablenkergeometrien mit voneinander abweichenden Geometrieparametern simuliert werden. Daher wurde eine Routine entwickelt, die für beliebige normierte Geometrieparameter und Elektrodenpotentiale alle Elektroden und Blenden automatisch trianguliert. Eine solche Triangulierung ist für den ersten Ablenker in den Abbildungen 9.2 und 9.3 dargestellt.

Von der CEOS GmbH in Heidelberg, die zur Zeit den Monochromator realisiert, wurde gefordert, daß ein Mikroskop auch bei abgeschaltetem Monochromator noch betrieben werden kann. Hierfür ist es notwendig im ersten Ablenker eine Bohrung mitzubedenken. Die Bohrungslöcher des ersten und des vierten Ablenkers weisen den gleichen Durchmesser wie die Blendenöffnungen auf. Sowohl die Bohrungen als auch die Blendenöffnungen liegen auf einer Achse. Daher kann der Strahl den Monochromator auch in ausgeschaltetem Zustand ungehindert passieren. Im Falle des zweiten und dritten Ablenkers sind keine Bohrungen notwendig. Da für die Feldberechnung die Symmetrie von Abbildung 9.1 vorausgesetzt wird, muß man bei der praktischen Realisierung des Ablenkers ein zusätzliches Loch von Durchmesser der Bohrung in die negative Elektrode bohren. Dieses Loch sitzt auf einer Achse mit dem Loch der Austrittsblende. Die Anordnung der Bohrungslöcher ist in Abbildung 9.4 eingezeichnet.

Die obere und die hintere Abschirmung werden ebenso wie die Blende und die kastenförmige Feldabschirmung vor der Blende auf das Beschleunigungsspannung U von Elektronen der Sollenergie gelegt. Die Abschirmungen verhindern, daß das Feld um die Blende herum greift. Die hintere Abschirmung ist weit vom Elektronenbündel entfernt, so daß ihr Einfluß auf das Feld in der Region des Strahls

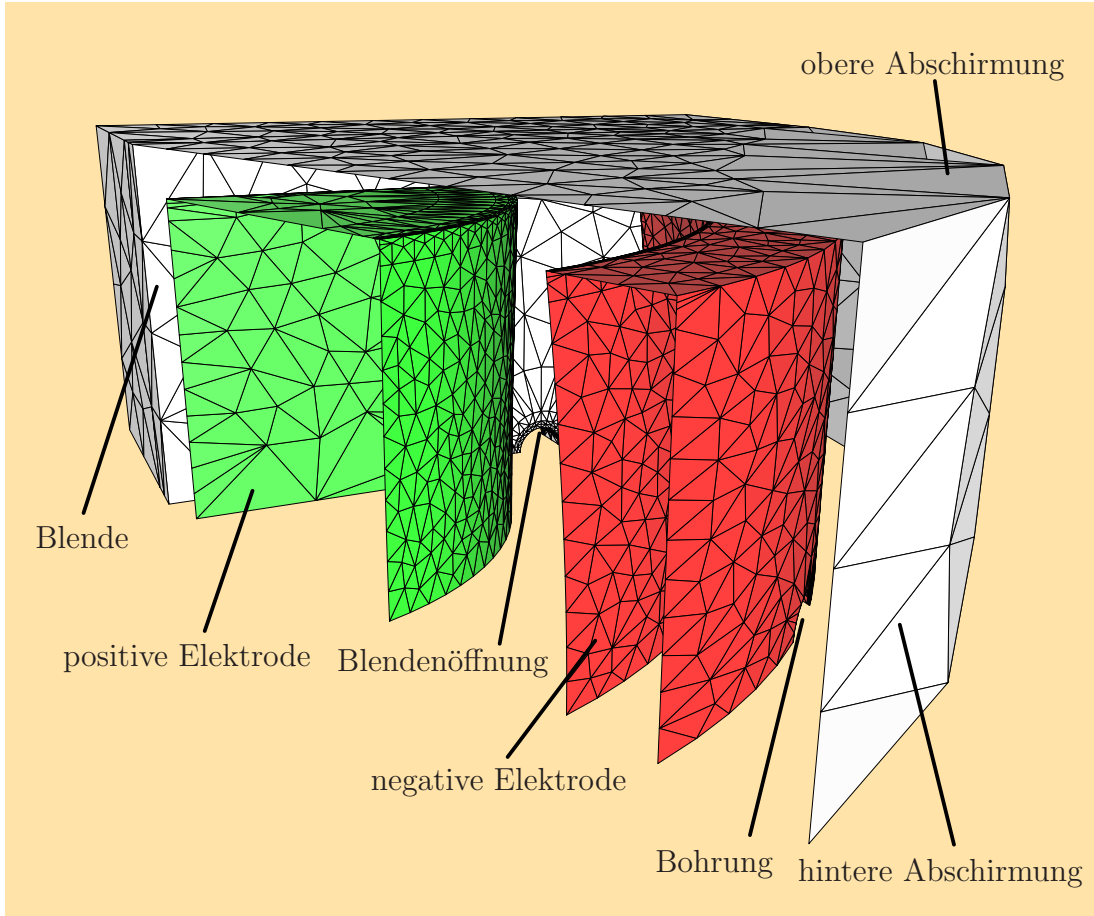


Abbildung 9.2: Seitenansicht der triangulierten Region des ersten Ablenkers.

vernachlässigbar klein ist. Die exakte Geometrie der Abschirmung ist daher für die Feldsimulation nicht relevant. Beim Bau des Monochromators können die hinteren Abschirmungen nicht auf die in Abbildung 9.2 gezeigte Weise realisiert werden, da dann die Elektronen im ausgeschalteten Zustand nach Passieren des Lochs gegen die hintere Abschirmung prallen würden. Es ist sinnvoller, die Elektroden des ersten und des vierten Ablenkers als Ganzes abzuschirmen.

Freie Geometrieparameter sind die Blendendicke, der Abstand d der Blenden von den Elektrodenflächen, der Abstand der Blendenöffnungen vom Ablenkermittelpunkt, die Radien der Blenden und der Bohrungen, die Höhe der Elektroden, der Abstand zwischen den Elektroden und der oberen Abschirmung und der Sektorwinkel ϕ . Die Querschnittsform der Elektroden wird mit Hilfe von (5.4) berechnet. Hierzu benötigt man die Brechkräfte μ_i der Ablenker im xz -Schnitt und die normierten Elektrodenspannungen $\hat{U}_E^{(\pm)}$ (5.7). Bei der Berechnung des realistischen

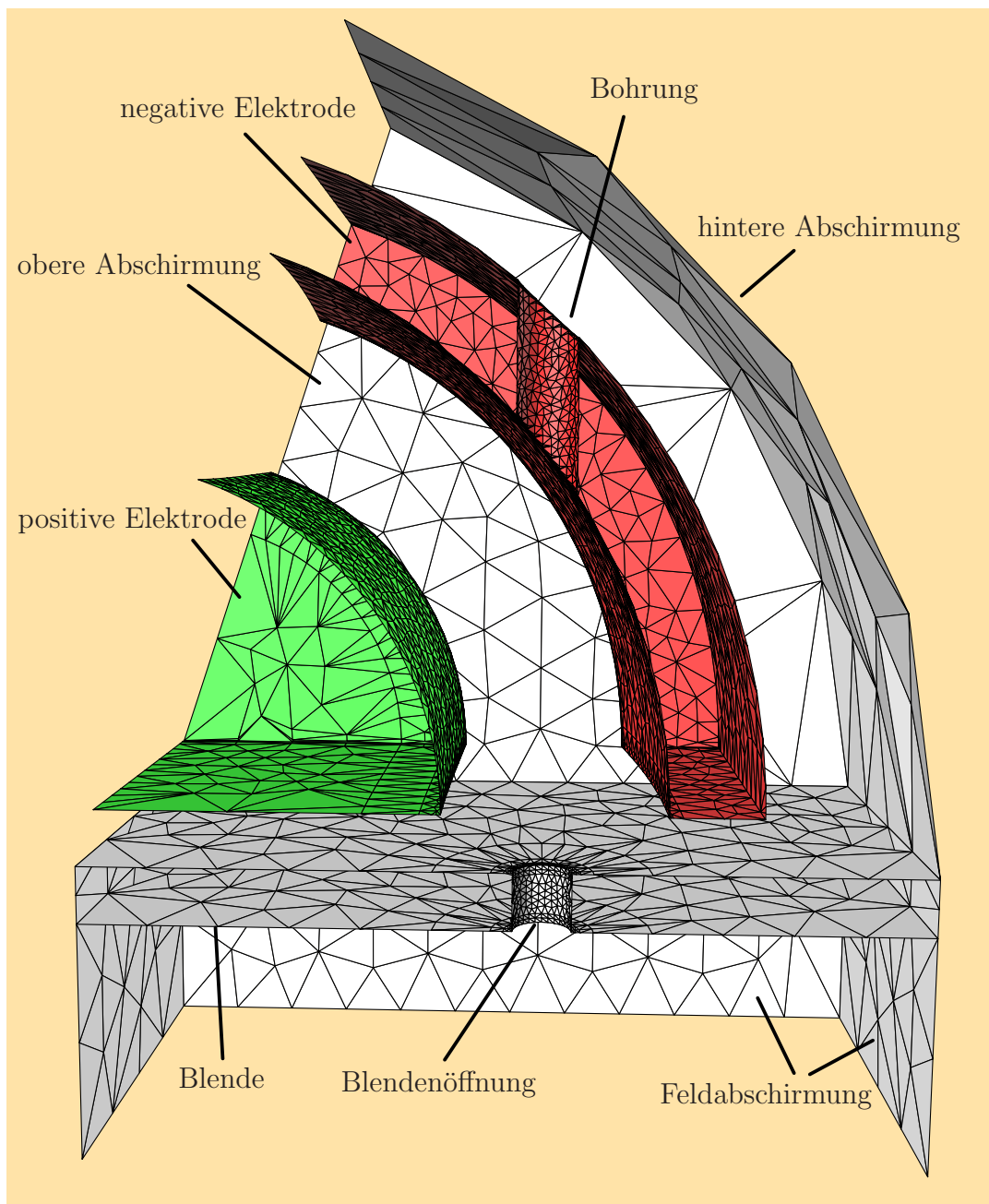


Abbildung 9.3: Unteransicht der triangulierten Region des ersten Ablenkers.

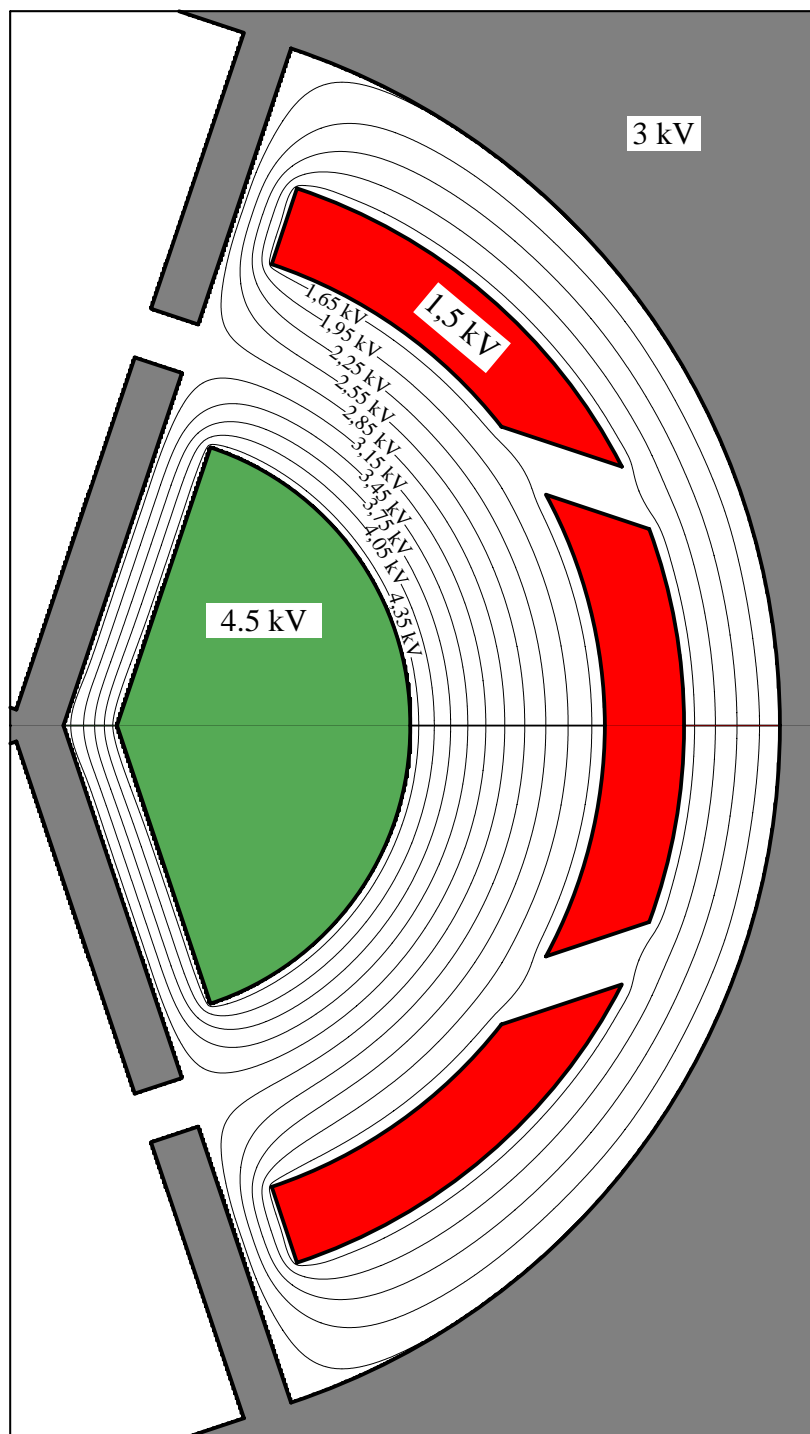


Abbildung 9.4: Äquipotentiallinien im ersten Ablenker.

Designs wurden für beide Ablenker die normierten Elektrodenspannungen

$$\hat{U}_E^{(+)} = 1,5 \quad , \quad \hat{U}_E^{(-)} = 0,5 \quad (9.3)$$

angenommen. Für eine Beschleunigungsspannung von $U = 3$ kV weist die negative Elektrode eine Potentialdifferenz von 1,5 kV gegenüber der Quelle auf. Im Falle der positiven Elektrode beträgt die Potentialdifferenz zur Quelle 4,5 kV. Es ist sinnvoll, die Potentialdifferenzen bei beiden Ablenkern gleich zu wählen, weil dann zwei Konstantspannungsquellen eingespart werden können.

Die Triangulation der Einzelflächen wird mit Hilfe des Programmpaketes **triangle** von Shewchuk [61] durchgeführt. Dieser Triangulator erlaubt die flexible Anpassung der Dreiecksdichte über die Fläche. Dies ist wichtig zur hinreichend genauen Approximation der Ladungsdichte an den Elektrodenkanten. Nach [62] besteht in unmittelbarer Umgebung von zwei rechtwinklig aneinanderstoßenden Oberflächen die Beziehung

$$\sigma \sim \rho^{-1/3} \quad (9.4)$$

zwischen der Ladungsdichte σ und dem Abstand ρ von der Kante. Die Flächenladungsdichte divergiert zur Kante hin. Um die Flächenladungsdichte hinreichend genau approximieren zu können, muß die Dreiecksdichte dem Verlauf (9.4) angepaßt zu Kanten hin immer dichter gewählt werden. An allen Kanten der Elektroden und der Blende, die dem Bündel nahe kommen, wird die Triangulierung auf diese Art verfeinert (siehe Abbildung 9.2 und 9.3). Alle übrigen strahlfernen Kanten werden nicht feiner trianguliert.

Die Äquipotentiallinien des simulierten Feldes in der Ebene der Einschnittsymmetrie sind für den ersten Ablenker in Abbildung 9.4 dargestellt. Für die Feldsimulation wurde hierbei die Ablenkergeometrie des in Abschnitt 9.4 iterativ bestimmten realistischen Designs gewählt. Die Beschleunigungsspannung U beträgt dabei 3 kV.

9.2 Justierung der optischen Achse

Zur Bestimmung der optischen Achse wird durch numerische Integration des Differentialgleichungssystems (8.24) die Bahn eines Elektron der Sollenergie $E_0 = eU$ durch das Feld des Ablenkens berechnet. Um einen symmetrischen Verlauf der Achse zu garantieren, startet das Elektron auf der SCOFF-Achse von der Symmetrieebene z_m des Ablenkens aus (siehe Abbildung 9.5). Die Geschwindigkeit ist dabei tangential zur SCOFF-Achse.

Wie in Abschnitt 5.4 beschrieben, wird die Position der Blenden von den Elektroden solange variiert, bis die reale Bahn parallel zur SCOFF-Bahn mit einem Versatz δx aus dem Ablenker tritt. Die Justierung erfolgt dabei in zwei Schritten.

Zuerst bleibt die Mitte der Blendenöffnung auf die SCOFF-Achse zentriert. Bei jeder Änderung des Abstandes d müssen die Triangulation der Geometrie und die Flächenladungsdichte neu berechnet werden. Das Iterationsverfahren zur Bestimmung des Abstands basiert dabei auf der Regula falsi.

Im zweiten Schritt wird die Lage der Blendenöffnung auf die reale um δx zur SCOFF-Achse versetzte Achse zentriert, wodurch sich das Feld in Umgebung der Blende geringfügig ändert. Ausgehend vom berechneten Blendenabstand aus dem ersten Schritt, wird solange nachiteriert, bis die Achse erneut parallel zur SCOFF-Achse verläuft. Der im zweiten Schritt berechnete Achsversatz unterscheidet sich nur unwesentlich (einige Prozent) vom Achsversatz vor der Nachiteration mit korrigierter Position der Blendenöffnung. Die Zentrierung der Blendenöffnung auf die reale Achse erleichtert die Justierung des Ablenkers beim Bau des Monochromators.

Da die Bewegungsgleichung für rein elektrische Felder invariant gegen Zeitumkehr ist, durchlaufen Elektronen bei Umkehrung der Flugrichtung dieselbe Flugbahn. Die optische Achse verläuft daher innerhalb des Ablenkers genau dann symmetrisch, wenn man mit dem Versatz δx parallel zur SCOFF-Achse einstrahlt. Die

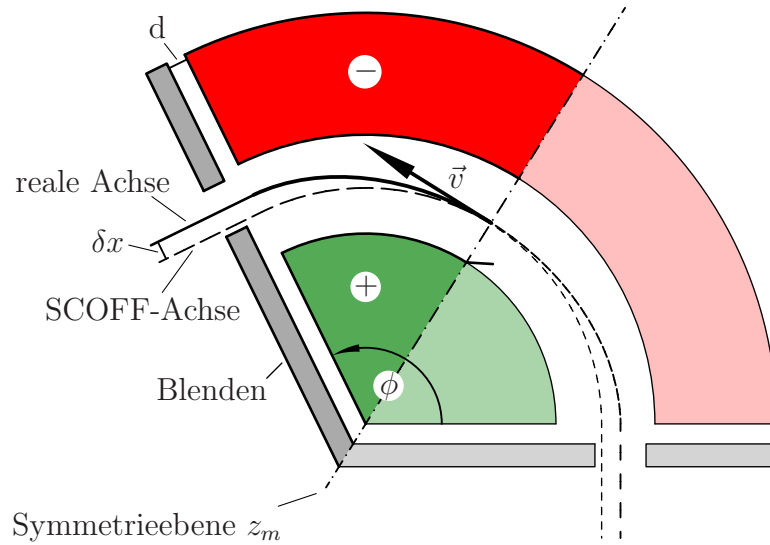


Abbildung 9.5: Justierung der Ablenkerachse.

Lösung des Differentialgleichungssystems (8.24) liefert außer der optischen Achse auch alle benötigten Fundamentalbahnen, die dispersive Bahn sowie alle notwendigen Multipolkomponenten und deren Ableitungen entlang der Achse. Die Anfangsbedingungen für die Fundamentalbahnen und die dispersive Bahn sind dabei zweckmäßigerweise nicht wie in Kapitel 6 gewählt. Wenn sichergestellt ist, daß die Fundamentalbahnen in einem Ablenker linear unabhängig sind, lassen sich die Fundamentalbahnen und die dispersive Bahn auf beliebige Anfangsbedingungen durch Linearkombination umrechnen. Die Bahnen des gesamten Monochromators lassen sich aus den Bahnen der einzelnen Ablenker durch geometrische Skalierung und Linearkombination bestimmen.

Die normierten Multipolkomponenten

$$\hat{\Phi}_\lambda = \frac{\Phi_\lambda}{U} R_1^\lambda \quad , \quad \lambda = 1, 2, 4, 3 \quad (9.5)$$

sind in Abbildung 9.6 für den ersten Ablenker des in Abschnitt 9.5 vorgestellten realistischen Designs aufgetragen.

Die normierten Multipolstärken $\hat{\Phi}_\lambda, \lambda \geq 0$, aus denen bei der Triangulation mit Hilfe der Potentialentwicklung (5.4) die Oberflächen der Elektroden berechnet werden, lauten für diesen Ablenker

$$\begin{aligned} \hat{\Phi} & \stackrel{(9.1)}{=} 1 \quad , \\ \hat{\Phi}_1 & \stackrel{(5.2)}{=} 2 \frac{\Phi}{R} \stackrel{(9.1)}{=} 2 \quad , \\ \hat{\Phi}_2 & = 0,53883 \Leftrightarrow \mu_1 \stackrel{(7.13)}{=} \sqrt{\frac{5}{2} - \hat{\Phi}_2} = 1.40042 \quad , \\ \hat{\Phi}_\lambda & = 0 \quad \text{für } \lambda > 2 \quad . \end{aligned} \quad (9.6)$$

Da im Innenbereich des Ablenkers der Einfluß der Randfelder klein ist, ist zu erwarten, daß durch die Ladungssimulation die Werte (9.6) in der Symmetrieebene mit hoher Genauigkeit reproduziert werden. Mit Hilfe der Werte in der Symmetrieebene läßt sich daher die Güte der Feldsimulation testen.

Man erhält aus der Ladungssimulation des Ablenkers für $z = z_m$ die Werte

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}^{(sim)}(z_m) & = 1,00044 \quad , \\ \hat{\Phi}_1^{(sim)}(z_m) & = 1,99956 \quad , \\ \hat{\Phi}_2^{(sim)}(z_m) & = 0,52633 \Leftrightarrow \mu_1 = 1,40487 \quad , \\ \hat{\Phi}_3^{(sim)}(z_m) & = 2,78 \times 10^{-3} \quad , \\ \hat{\Phi}_4^{(sim)}(z_m) & = 3,70 \times 10^{-2} \quad . \end{aligned} \quad (9.7)$$

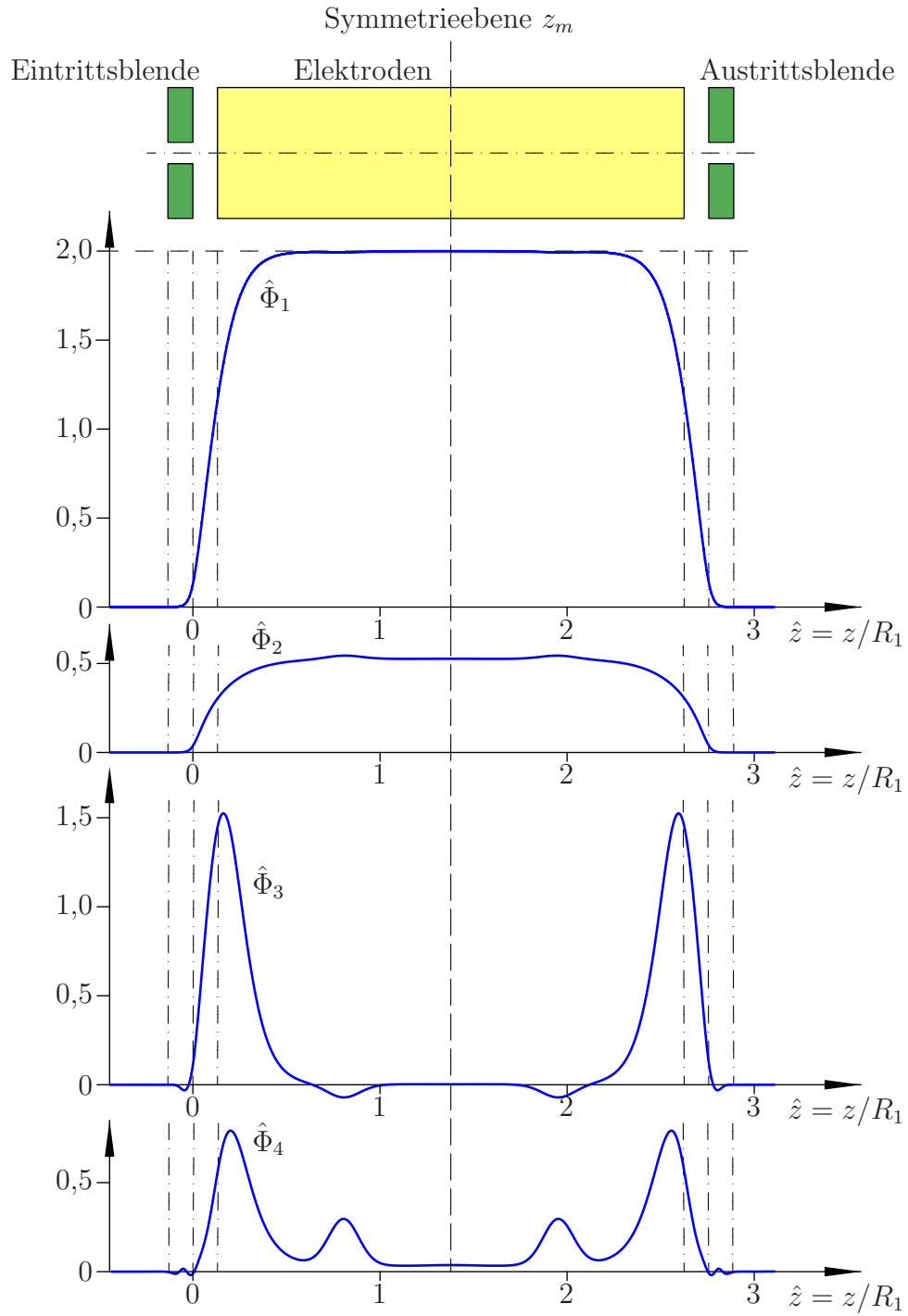


Abbildung 9.6: Normierte Multipole $\hat{\Phi}_i, i = 1, 2, 3, 4$ entlang der justierten Achse des ersten Ablenkers. Die Achse ist hier abgewickelt dargestellt.

Der relative Fehler beträgt für $\hat{\Phi}$ und $\hat{\Phi}_1$ nur Bruchteile eines Promilles. Die Brechkraft wird auf 3 Promille genau reproduziert. Das relativ starke Oktupolmoment $\hat{\Phi}_4^{(sim)}$ rührt vom Einfluß der oberen Abschirmung her.

Die starken äußeren Hexapol- und Oktupolpeaks entstehen durch den schrägen Verlauf der realen optischen Achse gegenüber der SCOFF-Achse im Bereich des Randfeldes. Die mit zunehmender Multipolordnung stärker ausgeprägten inneren Peaks werden durch die Bohrungslöcher verursacht.

9.3 Synthese des Gesamtsystems

Die Bestimmung des realistischen Designs ist ein iterativer Prozeß. In jedem Schritt wird aus dem Satz der normierten Geometrieparameter l , δ , s , ϕ , r , μ_1 und μ_2 ein Gesamtsystem berechnet und bewertet. Im ersten Schritt sind die Geometrieparameter durch die SCOFF Lösung gegeben (siehe (7.2), (7.13) und Abbildung 7.1). Bei einem realen Design kommen noch zusätzliche Konstruktionsgrößen wie die Dicke der Feldblenden, der Durchmesser der Blendenöffnungen oder die Höhe der Monochromatorelektroden hinzu. Beim Bau des Monochromators ist es sinnvoll, für diese Konstruktionsgrößen „glatte“ Werte – beispielsweise Vielfache eines Millimeters – zu wählen. Diese sollen auch während der Optimierungsprozedur von der SCOFF-Lösung zum realistischen Design konstant bleiben.

Die absolute Größe des Monochromators wird durch zwei Randbedingungen eingeschränkt. Zum einen soll die maximale Baulänge von der Eintrittskante des ersten zur Austrittskante des vierten Ablenkens ca. 10 cm nicht überschreiten. Zum anderen wird die Ausdehnung senkrecht zur Mikroskopachse durch die Größe des Vakuumtopfes der Quelle beschränkt, sofern das Vakuumsystem der Quelle nicht komplett neu konstruiert werden soll. Der Monochromator wurde bei der Iteration unter Einhaltung dieser Randbedingungen so groß wie möglich gewählt, um bei gegebener Beschleunigungsspannung eine möglichst hohe Dispersion in der Symmetrieebene z_s zu erzielen. Wie jedoch in Kapitel 10 gezeigt wird, ist diese Strategie wegen der Auswirkungen des Boersch-Effekts nicht in allen Fällen sinnvoll. Vielmehr sollte die Dispersion nur so groß gewählt werden, daß die Konstruktion des Selektionsschlitzes noch problemlos möglich ist. Die Dispersion des mit Hilfe dieser Strategie bestimmte Systems (siehe nächsten Abschnitt) liegt jedoch genau in der gewünschten Größenordnung.

Mit Hilfe der normierten Geometrieparameter δ , s , ϕ , r , μ_1 und μ_2 wird der größtmögliche Radius R_1 der SCOFF-Achse des ersten Ablenkens bestimmt,

der die Randbedingungen noch einhält. Hierbei wird als Näherungsannahme die SCOFF-Geometrie vorausgesetzt. Die Versätze δx_1 und δx_2 der realen Achsen gegenüber den SCOFF-Achsen (Abbildung 5.6) werden dabei vernachlässigt, da sie vor Durchführung der Feldsimulation und Justierung der Achse noch nicht bekannt sind. Da die Versätze in der Größenordnung von 0,1 mm liegen, ist der durch ihre Vernachlässigung gemachte Fehler bei der Bestimmung von R_1 klein.

Zur Feldsimulation und zur Justierung der Achse werden beide Ablenker so skaliert, daß die SCOFF-Achse jeweils einen Radius von Eins aufweist. Eine fest vorgegebene Länge p_i entspricht im Falle des ersten und des zweiten Ablenkers den normierten Längen

$$\hat{p}_i^{(1)} = \frac{p_i}{R_1} \quad \text{beziehungsweise} \quad \hat{p}_i^{(2)} = \frac{p_i}{R_2} = \frac{p_i}{r R_1} \quad . \quad (9.8)$$

Dies sei im folgenden anhand eines konkreten Beispiels erläutert. Die Dicke der Feldblenden beider Ablenker sei unabhängig von der Geometrie und Skalierung des Monochromators mit 3 mm fest vorgegeben. Für eine Geometrie mit einem Radienverhältnis von $r = R_2/R_1 = 1.14$ errechnet man aus den Randbedingungen an die Monochromatorgröße einen maximalen Radius des ersten Ablenkers von $R_1 = 21$ mm. Die zur Simulation des ersten und des zweiten Ablenkers verwendeten normierten Dicken $t^{(i)}$ der Blenden lauten dann

$$t^{(1)} = \frac{3 \text{ mm}}{21 \text{ mm}} = 0,1429 \quad \text{beziehungsweise} \quad t^{(2)} = \frac{3 \text{ mm}}{1,14 \cdot 21 \text{ mm}} = 0,1253 \quad . \quad (9.9)$$

Mit Hilfe der normierten Geometrieparameter und der normierten Konstruktionsgrößen $\hat{p}_i^{(j)}$, $j = 1, 2$ ist die Geometrie beider Ablenker vollständig definiert. Die Simulation der Felder, die Bestimmung der Fundamentalbahnen und der dispersiven Bahn sowie die Justierung der optischen Achse wird für beide Ablenker wie in den beiden vorherigen Kapiteln beschrieben durchgeführt. Versetzt man beide Ablenker um den Wert $\delta x_1 + \delta x_2$ lateral zueinander (siehe Abbildung 5.6), so verläuft auch die reale Achse omega-förmig.

Berücksichtigt man die Versätze, so erfüllt das Design möglicherweise die Randbedingungen an die Monochromatorgröße nicht mehr, da bei der Berechnung von R_1 die Versätze vernachlässigt werden. Wenn dies der Fall ist, muß das Verfahren mit einem entsprechend verkleinerten R_1 wiederholt werden. Es genügt nicht, einfach die Ablenker und die Bahnen umzuskalieren, da bei einer Änderung von R_1 sich auch die normierten Konstruktionsgrößen $p_i^{(j)}$, $i = 1, 2$ verändern. Deshalb ist eine erneute Simulation beider Ablenker erforderlich.

Die Fundamentalbahnen und die disperseive Bahn des zweiten Ablenkers werden mit Hilfe von (7.11) und (7.19) um den Faktor r skaliert. Anschließend wird

hieraus durch Linearkombination ein neuer Satz von Fundamentalbahnen und dispersiver Bahn so bestimmt, daß die Bahnen stetig differenzierbar an die Bahnen des ersten Ablenkers anschließen. Hierbei wird für den Abstand zwischen den Elektrodenkanten beider Ablenker δ angenommen.

Im nächsten Schritt wird durch Linearkombination aus den so gewonnen Bahnen des Gesamtsystems ein neuer Satz von Fundamentalbahnen und dispersiver Bahn konstruiert, der die in Kapitel 6 beschriebenen Anfangsbedingungen erfüllt. Beide axialen Bahnen schneiden die Mikroskopache im Abstand $|l|$ hinter der Eintrittskante des ersten Ablenkers (Ebene des virtuellen Eintrittsquellbildes) und weisen eine Steigung von Eins auf. Die Feldbahnen x_γ und y_δ sind symmetrisch beziehungsweise antisymmetrisch zur Symmetrieebene gewählt. Sie sind so normiert, daß ihre Asymptoten in der Ebene des virtuellen Eintrittsquellbildes den Wert Eins aufweisen. Die dispersive Bahn und ihre Steigung verschwindet in der Eingangebene des ersten Ablenkers.

Erfüllen die Fundamentalbahnen die vier Bedingungen (6.6), (6.7), (6.8) und (6.9), so ist die vorgebene Geometrie hinsichtlich ihres paraxialen Strahlengangs als Monochromator tauglich und die Iteration kann abgebrochen werden. Für die Startgeometrie der optimalen SCOFF-Lösung ergeben sich jedoch zum Teil beträchtliche Abweichungen der realen Fundamentalbahnen vom geforderten Verlauf.

9.4 Iterative Bestimmung des realistischen Designs

Im folgenden werden die Werte der linken Seiten der vier Bedingungsgleichungen (6.6), (6.7), (6.8) und (6.9) mit $f_i, i = 1, 2, 3, 4$ bezeichnet. Die im letzten Abschnitt dargestellte Prozedur läßt sich mathematisch durch die Funktion

$$\vec{F} : (l, \delta, s, r, \phi, \mu_1, \mu_2) \longrightarrow (f_1, f_2, f_3, f_4) \quad (9.10)$$

beschreiben. Die Berechnung eines möglichen Monochromatordesigns ist äquivalent zur Bestimmung einer Nullstelle dieser Funktion. Hierzu wird ein mehrdimensionales numerisches Newton-Verfahren verwendet [63].

Sei eine einmal stetig differenzierbare Funktion

$$\vec{f} : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m \quad (9.11)$$

und ein Schätzwert

$$\vec{x}^{(n)} \in \mathbb{R}^m \quad (9.12)$$

für eine Nullstelle der Funktion gegeben. Im Falle des Newton-Verfahrens wird der nächste Näherungswert

$$\vec{x}^{(n+1)} := \vec{x}^{(n)} + \Delta \vec{x}^{(n)} \quad (9.13)$$

für die Nullstelle durch Lösen des linearen $n \times n$ Gleichungssystems

$$\vec{f}(\vec{x}^{(n)}) + \mathbf{J}(\vec{x}^{(n)})\Delta \vec{x}^{(n)} = 0 \quad (9.14)$$

bestimmt. Die Matrix \mathbf{J} ist die Jacobimatrix der Funktion \vec{f} . Ihre Komponenten J_{ij} sind durch die partiellen Ableitungen der Komponenten $f_i, i = 1, \dots, n$ der Funktion nach den Parametern $x_j, j = 1, \dots, n$ gegeben:

$$J_{ij}(\vec{x}) := \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\vec{x}) \quad . \quad (9.15)$$

Ist – wie im vorliegenden Fall – keine analytische Darstellung für die Funktion \vec{f} bekannt, werden die partiellen Ableitungen durch die Differentialquotienten

$$J_{ij}(\vec{x}) \approx \frac{f_i(x_0, \dots, x_j + \Delta x_j, \dots, x_n) - f_i(x_0, \dots, x_j, \dots, x_n)}{\Delta x_j} \quad (9.16)$$

approximiert. Hierbei muß Δx_j entsprechend dem Verhalten der Funktion bei Änderung von x_j klein genug gewählt werden. Ob das Newton-Verfahren konvergiert, hängt davon ab, wie gut die Näherungslösung gewählt wurde.

Da die Funktion \vec{F} nur vier Ergebniswerte liefert, kann man unter den sieben Funktionsparametern vier zu variierende Parameter für das Newton-Verfahren frei wählen. Die übrigen drei bleiben konstant. Die vier gewählten Parameter werden im folgenden mit $x_i, i = 1, 2, 3, 4$ bezeichnet. Zur Bestimmung der Jacobimatrix sind fünf Auswertungen der Funktion \vec{F} an den Positionen

$$\begin{aligned} \vec{x}^{(0)} &:= (x_1, x_2, x_3, x_4)^T \\ \vec{x}^{(i)} &:= (x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_4)^T, \quad i = 1, 2, 3, 4 \end{aligned} \quad (9.17)$$

des Parameterraums notwendig.

Zur Minimierung der Rechenzeit wäre es günstig, als Variationsparameter x_i die Größen l, δ, s, r zu wählen. Bei den Funktionsauswertungen $\vec{F}(\vec{x}^{(0)})$ und $\vec{F}(\vec{x}^{(i)}), i \in \{1, 2, 3, 4\}$ zur Berechnung des Differentialquotienten für einen Parameter $x_i \in \{l, \delta, s, r\}$ bleiben die Brechkräfte der Ablenker μ_1, μ_2 und ihr Umlenkwinkel ϕ konstant. Wählt man zusätzlich den Radius R_1 für alle Funktionsauswertungen gleich, bleiben auch die normierten Konstruktionsgrößen konstant. Dies

bedeutet, daß die Geometrien der einzelnen Ablenker einschließlich der Blenden bei allen Auswertungen gleich bleiben. Daher ist für alle Funktionsauswertungen nur noch eine Justierung der Achse pro Ablenker notwendig.

Die Rechenzeit zur Bestimmung der Fundamentalbahnen und der dispersiven Bahn des Gesamtsystems aus den Ergebnissen für die Einzelablenker beträgt auf einer Digital ALPHASTation 500/500 nur wenige Sekunden. Die Justierung der Achse und die Berechnung der Bahnen und der Multipolmomente für beide Ablenker erfordert hingegen eine Rechenzeit von etwa einem Tag.

Bei den Auswertungen $\vec{F}(x^{(i)})$, $i = 1, 2, 3, 4$ verwendet man den Radius R_1 , der sich bei der Auswertung $\vec{F}(x^{(0)})$ aus den Randbedingungen an die Monochromatorgröße ergibt. Da sich bei diesen Auswertungen jeweils ein Parameter x_i um Δx_i geändert hat, werden möglicherweise die Randbedingungen an die Monochromatorgröße nicht mehr eingehalten. Diese Abweichungen sind jedoch im allgemeinen vernachlässigbar, da die relative Parameteränderung sehr klein gegen Eins gewählt wird:

$$\frac{|\Delta x_i|}{|x_i|} \ll 1 \quad . \quad (9.18)$$

Leider konvergiert das Newton-Verfahren für die Parameterwahl l, δ, s, r nicht, wenn man die SCOFF-Lösung als Startwert verwendet. Es zeigt sich, daß das Newton-Verfahren nur für die Parameterwahl l, μ_1, μ_2, ϕ konvergiert. Da jede Variation der Parameter μ_1, μ_2 und ϕ eine erneute Simulation der Ablenker erfordert, wird jeder Newton-Schritt extrem zeitaufwendig. Die Rechenzeit von der SCOFF-Lösung bis zum realistischen Design liegt in der Größenordnung von Wochen.

Aus konstruktionstechnischen Gründen soll die Ausdehnung des Monochromators, den die CEOS GmbH baut, senkrecht zur Mikroskopachse 11 cm nicht überschreiten. Wie sich im Verlauf der Newton-Iterationen zeigt, wird die maximale Größe durch diese Forderung und nicht durch die Beschränkung der Baulänge auf 10 cm vorgegeben.

9.5 Berechnetes realistisches Design

Für die Konstruktionsgrößen

Höhe der Elektroden	:	35,0 mm
Abstand zwischen Elektroden und oberer Abschirmung	:	2,5 mm
Dicke der Blenden	:	3,0 mm
Durchmesser der Blendenöffnungen	:	3,0 mm
Durchmesser der Bohrungen	:	3,0 mm
Beschleunigungsspannung U	:	3,0 kV
Potential der negativen Elektroden	:	1,5 kV
Potential der positiven Elektroden	:	4,5 kV

wurde von der SCOFF-Lösung aus startend ein realistisches Design berechnet. Bei einem Radius des ersten Ablenkens von

$$R_1 = 22.50 \text{ mm} \quad (9.19)$$

weist bei diesem Design die Innenfläche der negativen Elektrode des zweiten Ablenkens einen maximalen Abstand von 10,62 cm von der Mikroskopachse auf. Die Forderung nach einer maximalen Ausdehnung des Monochromators senkrecht zur Mikroskopachse von 11 cm ist somit erfüllt. Die Baulänge von der Eintrittskante der Eintrittsblende des ersten Ablenkens bis zur Austrittskante der Austrittsblende des vierten Ablenkens beträgt 7,45 mm. Die Anordnung der Ablenkerelektroden ist in 9.7 abgebildet. Um die Elektroden besser erkennen zu können, sind die Blenden und die Abschirmungen weggelassen. Die Abbildungen 9.2 und 9.3 zeigen die zur Ladungssimulation verwendete Triangulierung des ersten Ablenkens.

Die Fundamentalbahnen des realistischen Design sind in Abbildung 9.8 aufgetragen. Die Dispersion in der Symmetrieebene beträgt

$$D = 16,35 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}} \quad (9.20)$$

Wie in Abschnitt 2.2.4 dargelegt wurde, reicht für das SÅTEM eine Reduzierung der Energiebreite des Strahls auf ein FWHM von 0,3 eV aus, um eine Punktauflösung von deutlich unter 1 Å zu erzielen. Dies entspricht einer Schlitzbreite von 4,9 μm . Da durch Instabilitäten der Beschleunigungsspannung hinter dem Monochromator noch eine nachträgliche Energieverbreiterung auftreten kann, fordern wir im folgenden eine Energiebreite unmittelbar hinter dem Monochromator von 0,2 eV. Hierfür ist eine Schlitzbreite von 3,2 μm erforderlich. Dies ist technologisch problemlos beherrschbar. Für alle nachfolgenden Überlegungen gehen wir von einer Energiebreite nach der Filterung von 0,2 eV aus.

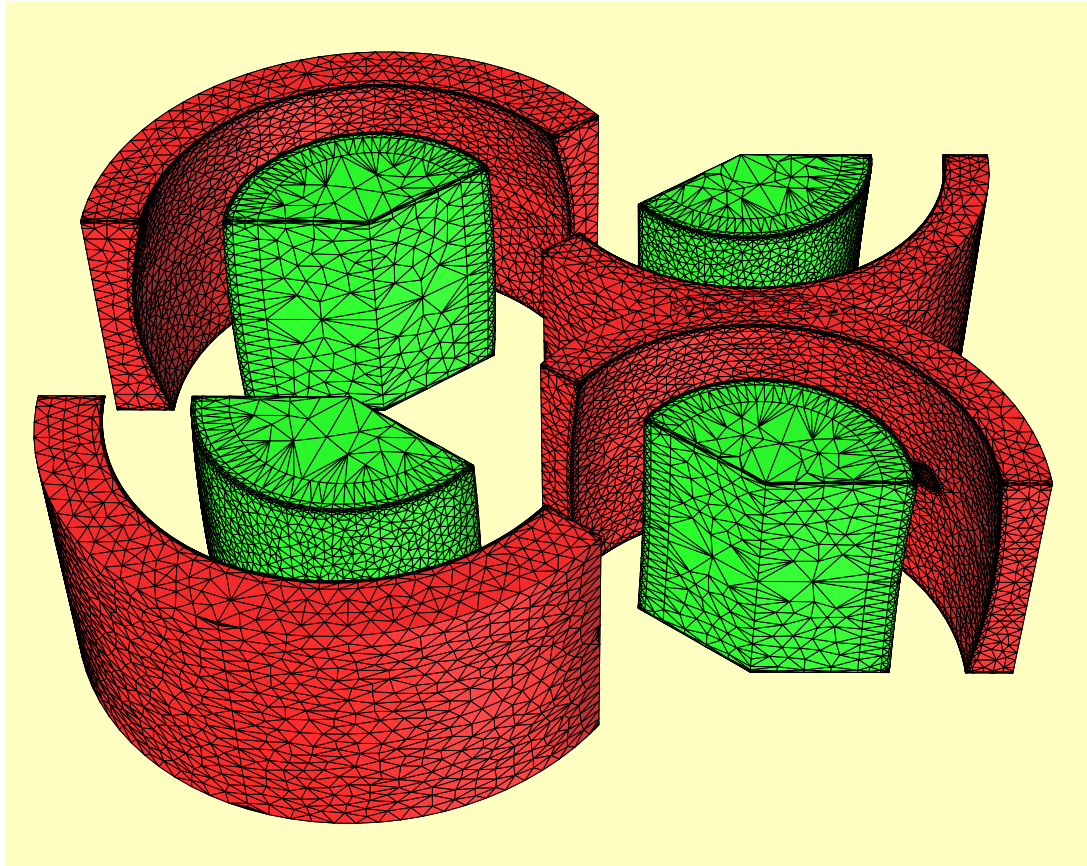


Abbildung 9.7: Anordnung der Elektroden des realistischen Designs.

9.6 Qualität der Energiefilterung

Wie in Kapitel 3 dargelegt, ist die Vorvergrößerung der Quelle bei Verwendung eines einlinsigen Kondensorsystems auf etwa 10 beschränkt. Das von der CEOS GmbH in Heidelberg konzipierte Beleuchtungssystem bildet die Quelle mit einer Vorvergrößerung von 6 in die Ebene z_i des virtuellen Eintrittsquellbildes ab.

Der effektive Durchmesser der verwendeten thermischen Feldemissionsquelle beträgt etwa 20 nm, solange man nur mit denjenigen Elektronen beleuchtet, die unter einem Winkel von höchstens einigen Millirad zur Achse emittiert werden. Das virtuelle Bild der Quelle in der Ebene z_i hat nach der Vergrößerung einen Durchmesser von 120 nm. Deshalb gilt für die Parameter γ und δ

$$\gamma, \delta \in [-60 \text{ nm}, 60 \text{ nm}] \quad . \quad (9.21)$$

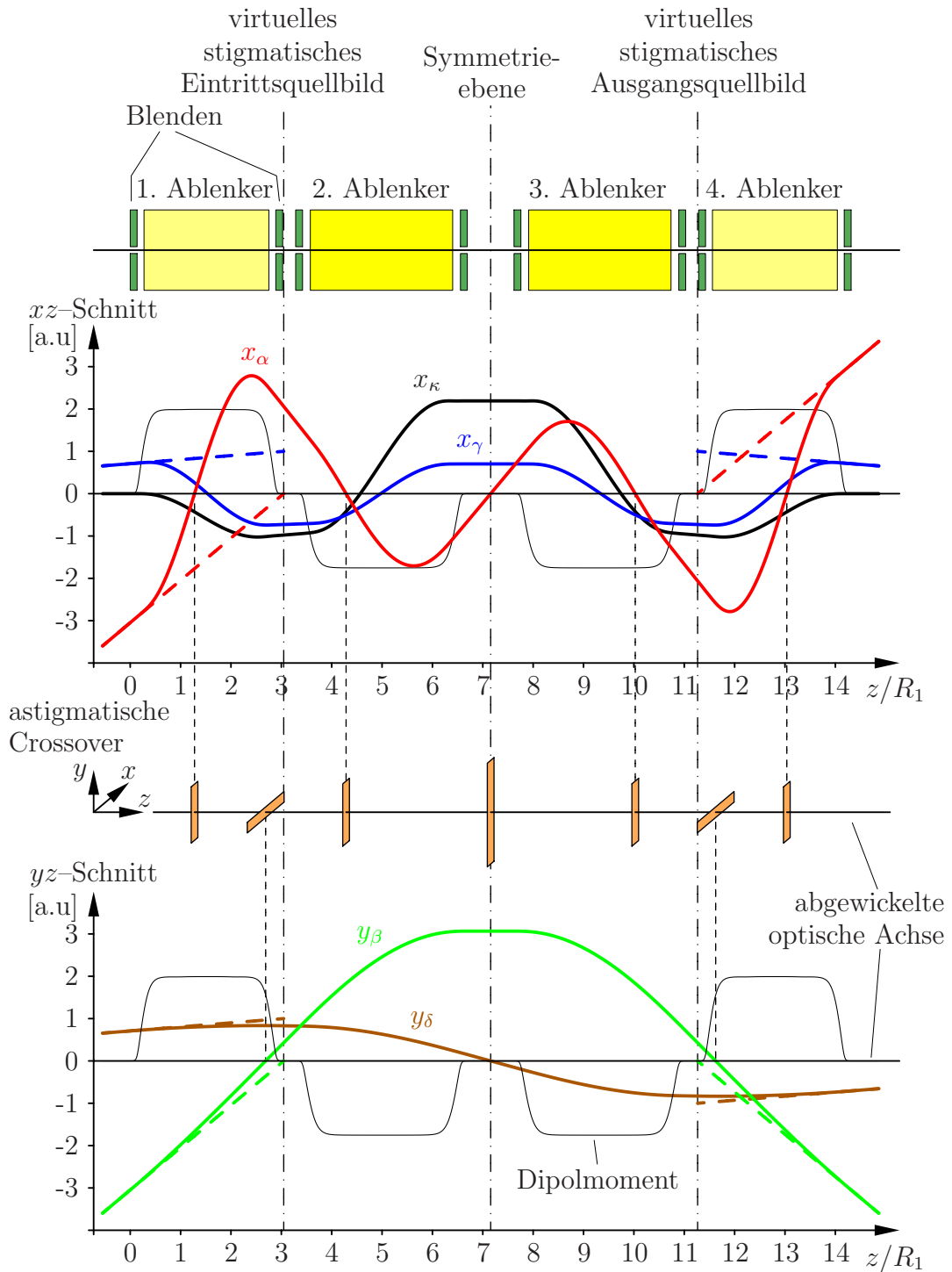


Abbildung 9.8: Fundamentalbahnen, dispersive Bahn und Positionen der astigmatischen Crossover des realistischen Systems.

Da der Monochromator im xz -Schnitt bei der Abbildung von der Ebene z_i in die Ebene z_s um den Faktor $x_\gamma(z_s) = 0,7$ vergrößert, beträgt in der Selektionsebene die Breite des Gaußschen Bildes der Quelle im xz -Schnitt 84 nm. Das sind nur 2,6 % der Breite des Selektionsschlitzes für eine Energiebreite von 0,2 eV. In der Realität weisen die linienförmigen Bilder der Quelle aufgrund des Einflusses der Bildfehler eine deutlich größere Breite auf.

Ist die Breite der linienförmigen Bilder sehr klein gegenüber der Schlitzbreite, so besitzt der Strahl nach Passieren der Blende nahezu in Abbildung 9.9 gezeigte Energieverteilung für ein ideales, unendlich dünnes Linienbild der Quelle. Hierbei wurde für die Quelle eine gaußförmige Energieverteilung mit einer FWHM von 0,7 eV angenommen.

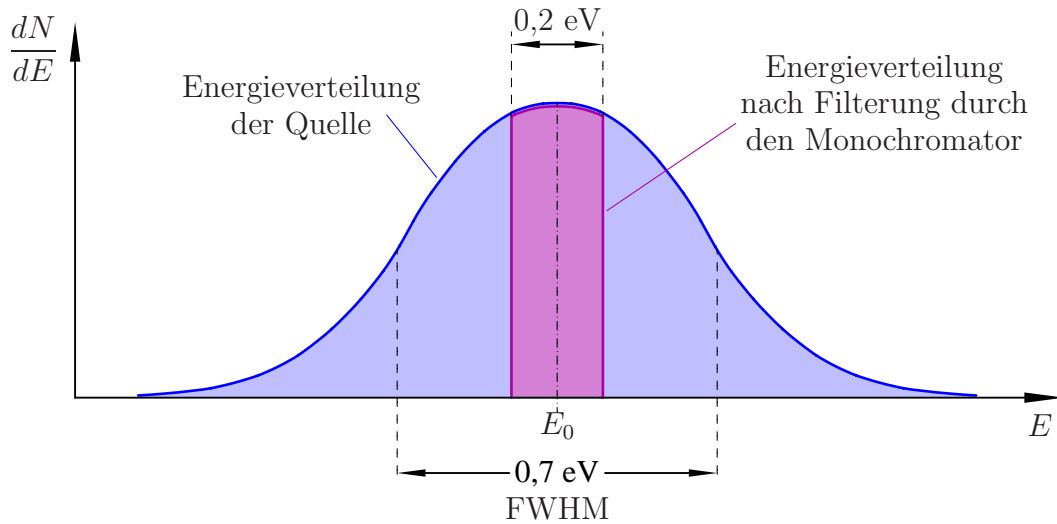


Abbildung 9.9: Energieverteilung nach der Filterung für eine ideal punktförmige Quelle unter Vernachlässigung der Bildfehler des Monochromators.

Liegt die Linienbreite dagegen aufgrund der Abbildungsfehler des Monochromators oder aufgrund der gewählten Vorvergrößerung in der Größenordnung der Schlitzbreite, so werden dadurch die scharfen Ränder der Energieverteilung aufgeweicht. Wie in Abbildung 9.13 dargestellt, kann dann auch ein Teil der Elektronen mit einer Energieabweichung $|\Delta E| > 0,1$ eV, deren Gaußsches Bild bereits vollständig auf der Blende liegt, den Schlitz passieren. Dafür werden einige Elektronen mit $|\Delta E| \leq 0,1$ eV herausgefiltert.

Stimmen die Schlitzbreite und die Breite der Linienbilder gerade überein, passieren nur noch Elektronen der Sollenergie E_0 die Schlitzblende ohne Verluste. Die Verteilungsfunktion besitzt dann den in Abbildung 9.10 gezeigten Verlauf. Das FWHM dieser Verteilung liegt dann bei 0,2 eV. Wird die Linienbreite jedoch deutlich größer als die Schlitzbreite, wird die Verteilung breiter und flacher. Die FWHM der Verteilung wächst dabei drastisch an. Daher muß sichergestellt sein, daß die Breite der Linienbilder der Quelle von der selben Größenordnung oder kleiner ist als die Breite des Selektionsschlitzes. Diese Problematik wird im nächsten Abschnitt für das berechnete realistische Design diskutiert.

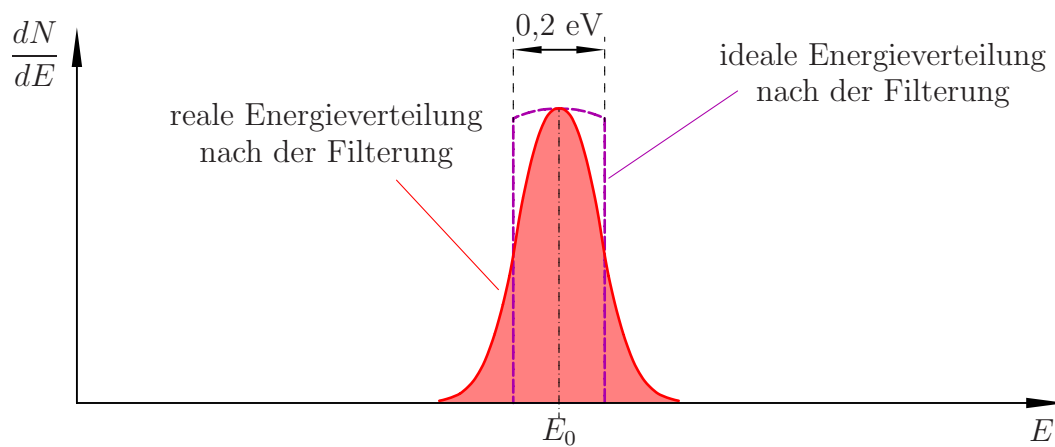


Abbildung 9.10: Reale Energieverteilung nach der Filterung falls die Breite der linienförmigen Quellbilder in der Größenordnung der Schlitzbreite liegt.

In einem hochauflösenden TEM wird ein Strom von ein bis drei Nanoampere zur Beleuchtung des Objekts benötigt. Bei einer Gaußförmigen Energieverteilung der Quelle mit einem FWHM von 0,7 eV weisen 74 % der Elektronen eine zu hohe Energieabweichung $|\Delta E| > 0,1$ eV auf und werden daher ausgefiltert. Somit benötigt man einen Strom in der Eingangsebene des Monochromators von etwa $I_e = 10$ nA um in der Ausgangsebene genügend Strom für die Beleuchtung des Objekts zu erhalten. Es muß allerdings sichergestellt sein, daß zwischen dem Monochromator und dem Objekt kein zusätzlicher Verlust an Strom mehr auftritt.

Es existieren jedoch auch spezielle Abbildungsmodi, für die ein höherer Beleuchtungsstrom von einigen zehn Nanoampere wünschenswert ist. Im Idealfall sollte der Monochromator daher Eingangsströme von 10 nA bis etwa 100 nA akzeptie-

ren, ohne daß die Qualität der Filterung negativ beeinflußt wird und der Richstrahlwert zu stark sinkt.

Für thermische Feldemissionsquellen läßt sich für Emissionswinkel im Bereich von einigen Millirad ein Winkelstrom j_Ω von etwa

$$j_\Omega = 0,3 \frac{\text{mA}}{\text{srd}} \quad (9.22)$$

problemlos erreichen. Blendet man Hilfe einer Stromselektionsblende im Kondensorsystem alle Elektronen mit Emissionswinkeln größer als

$$\alpha_Q = \sqrt{\frac{I_e}{\pi j_\Omega}} \quad (9.23)$$

aus, so erhält man gerade den Strom I_e in der Eingangsebene. Bei einer Vorvergrößerung von $M = 6$ entspricht dies einem Semiöffnungswinkel des konvergenten Bündels von

$$\alpha_{max} = \frac{\alpha_Q}{M} \quad (9.24)$$

bei Eintritt in den Monochromator. In Abbildung 9.11 ist das Kondensorsystem und das Prinzip der Stromselektion schematisch dargestellt.

Bei einem Winkelstrom von (9.22) und einer Vorvergrößerung von $M = 6$ entspricht ein Eingangsstrom von 10 nA einem Semiöffnungswinkel von $\alpha_{max} = 0,54$ mrad. Für einen Eingangsstrom von 100 nA beträgt der Semiöffnungswinkel $\alpha_{max} = 1,72$ mrad. Die Parameter α und β sind somit durch

$$\begin{aligned} \alpha, \beta &\in [-0,54 \text{ mrad}; 0,54 \text{ mrad}] \quad \text{für } I_e = 10 \text{ nA} \quad \text{beziehungsweise} \\ \alpha, \beta &\in [-1,72 \text{ mrad}; 1,72 \text{ mrad}] \quad \text{für } I_e = 100 \text{ nA} \end{aligned} \quad (9.25)$$

begrenzt.

9.7 Einfluß der Bildfehler bei idealer Justierung

Wie in Kapitel 6 eingeführt, wird die Eingangsebene des Monochromators mit z_e , die Ausgangsebene mit z_a , die Ebene des virtuellen Eintrittsquellbildes mit z_i , die Ebene des virtuellen Austrittsquellbildes mit z_f und die Symmetrieebene mit z_s bezeichnet. Schreibt man die Beziehung (4.118) auf den reellen Fundamentalebahnsatz $x_\alpha, x_\gamma, y_\beta, y_\delta$ des realistischen Designs um, so erhält man für die reellen

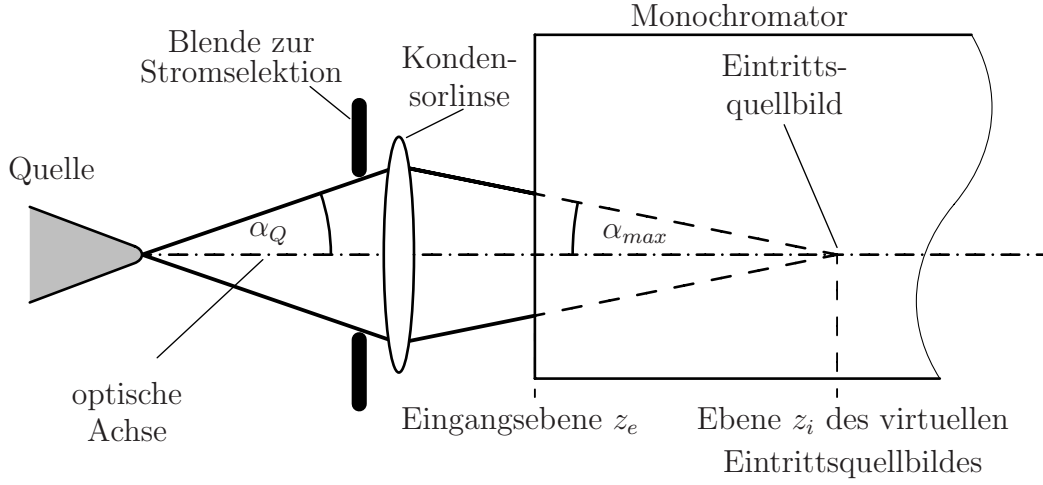


Abbildung 9.11: Vorvergrößerung der Quelle und Stromselektion.

Bahnstörungen $x^{(r)}$ im xz -Schnitt und $y^{(r)}$ im yz -Schnitt

$$\begin{aligned}
 x^{(r)}(z) &= x_\alpha(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Re} \{s^{(r)}\} x_\gamma d\tilde{z} - x_\gamma(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Re} \{s^{(r)}\} x_\alpha d\tilde{z} \quad , \\
 y^{(r)}(z) &= y_\beta(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Im} \{s^{(r)}\} y_\delta d\tilde{z} - y_\delta(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Im} \{s^{(r)}\} y_\beta d\tilde{z}
 \end{aligned}
 \tag{9.26}$$

falls $r > 1$ gilt. Der Realteil und der Imaginärteil von $s^{(r)}$ wurde mit Hilfe des Computeralgebrasystems **Maple**® für $r = 2$ und $r = 3$ nach dem in Abschnitt 4.4.4 beschriebenen Verfahren bestimmt. Man erhält jeweils zwei homogene Polynome der Stufe r in $\alpha, \gamma, \beta, \delta$ und κ . Die Polynomkoeffizienten

$$k_{\mu \dots \nu}(\tilde{z}) \quad , \quad \underbrace{\mu, \dots, \nu}_{r \text{ Parameter}} \in \{\alpha, \gamma, \beta, \delta, \kappa\}
 \tag{9.27}$$

hängen dabei von der Integrationsvariablen \tilde{z} (Bogenlänge entlang der Achse) ab. Sie sind Produkte aus den Multipolkoeffizienten Φ_l , den Bahnstörungen

$$x^{(l)}, y^{(l)} \quad , \quad 1 \leq l < r
 \tag{9.28}$$

niedrigerer Stufe und den Ableitungen dieser Größen. Der Koeffizient $k_{\alpha\alpha}$ des Polynoms $\text{Re}\{s^{(2)}\}$ zweiter Stufe hat beispielsweise die Gestalt

$$\begin{aligned}
 k_{\alpha\alpha} = & \left\{ \frac{\Phi_1}{\Phi^2} - \frac{\Phi'_1}{\Phi} \right\} x_\alpha' x_\alpha - \frac{\Phi_1}{2\Phi_0} x_\alpha' x_\alpha' \\
 & + \left\{ \frac{3}{2} \frac{\Phi_3}{\Phi} + \frac{3}{32} \frac{\Phi_1 \Phi'^2}{\Phi^3} + \frac{25}{64} \frac{\Phi_1 \Phi''}{\Phi^2} + \frac{113}{128} \frac{\Phi_1^3}{\Phi^3} \right. \\
 & \left. - \frac{37}{16} \frac{\Phi_1 \Phi_2}{\Phi^2} - \frac{3}{16} \frac{\Phi_1''}{\Phi} - \frac{3}{32} \frac{\Phi'_1 \Phi'}{\Phi^2} \right\} x_\alpha x_\alpha \quad .
 \end{aligned} \tag{9.29}$$

Alle anderen Koeffizienten sind nach dem gleichen Schema aufgebaut.

Die Fehlerbahnen im xz - und im yz -Schnitt (siehe Abschnitt 4.4.4) lassen sich mit Hilfe der Integrale

$$\begin{aligned}
 C_{\mu\dots\nu}(z) &= x_\alpha(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\mu\dots\nu} x_\gamma d\tilde{z} - x_\gamma(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\mu\dots\nu} x_\alpha d\tilde{z} \quad , \\
 C_{\eta\dots\xi}(z) &= y_\beta(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\eta\dots\xi} y_\delta d\tilde{z} - y_\delta(z) \int_{z_e}^z \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\eta\dots\xi} y_\beta d\tilde{z}
 \end{aligned} \tag{9.30}$$

aus den Koeffizienten bestimmen. Hierbei steht $k_{\mu\dots\nu}$ für einen Koeffizienten des Polynoms $\text{Re}\{s^{(r)}\}$ und $k_{\eta\dots\xi}$ für einen Koeffizienten des Polynoms $\text{Im}\{s^{(r)}\}$. Für den Zusammenhang zwischen den Bahnstörungen und den Fehlerbahnen erhält man

$$\begin{aligned}
x^{(2)} &= C_{\alpha\alpha}\alpha\alpha + C_{\beta\beta}\beta\beta + C_{\alpha\gamma}\alpha\gamma + C_{\beta\delta}\beta\delta \\
&\quad + C_{\gamma\gamma}\gamma\gamma + C_{\delta\delta}\delta\delta + C_{\alpha\kappa}\alpha\kappa + C_{\gamma\kappa}\gamma\kappa + C_{\kappa\kappa}\kappa\kappa \quad , \\
y^{(2)} &= C_{\alpha\beta}\alpha\beta + C_{\alpha\delta}\alpha\delta + C_{\beta\gamma}\beta\gamma + C_{\gamma\delta}\gamma\delta \\
&\quad + C_{\beta\kappa}\beta\kappa + C_{\delta\kappa}\delta\kappa \quad , \\
x^{(3)} &= C_{\alpha\alpha\alpha}\alpha\alpha\alpha + C_{\alpha\beta\beta}\alpha\beta\beta \\
&\quad + C_{\alpha\alpha\gamma}\alpha\alpha\gamma + C_{\beta\beta\gamma}\beta\beta\gamma + C_{\alpha\beta\delta}\alpha\beta\delta \\
&\quad + C_{\alpha\gamma\gamma}\alpha\gamma\gamma + C_{\alpha\delta\delta}\alpha\delta\delta + C_{\beta\gamma\delta}\beta\gamma\delta \\
&\quad + C_{\gamma\gamma\gamma}\gamma\gamma\gamma + C_{\gamma\delta\delta}\gamma\delta\delta \\
&\quad + C_{\alpha\alpha\kappa}\alpha\alpha\kappa + C_{\beta\beta\kappa}\beta\beta\kappa \\
&\quad + C_{\alpha\gamma\kappa}\alpha\gamma\kappa + C_{\beta\delta\kappa}\beta\delta\kappa \\
&\quad + C_{\gamma\gamma\kappa}\gamma\gamma\kappa + C_{\delta\delta\kappa}\delta\delta\kappa \\
&\quad + C_{\alpha\kappa\kappa}\alpha\kappa\kappa + C_{\gamma\kappa\kappa}\gamma\kappa\kappa + C_{\kappa\kappa\kappa}\kappa\kappa\kappa \quad , \\
y^{(3)} &= C_{\alpha\alpha\beta}\alpha\alpha\beta + C_{\beta\beta\beta}\beta\beta\beta \\
&\quad + C_{\alpha\alpha\delta}\alpha\alpha\delta + C_{\beta\beta\delta}\beta\beta\delta + C_{\alpha\beta\gamma}\alpha\beta\gamma \\
&\quad + C_{\alpha\gamma\delta}\alpha\gamma\delta + C_{\beta\gamma\gamma}\beta\gamma\gamma + C_{\beta\delta\delta}\beta\delta\delta \\
&\quad + C_{\gamma\gamma\delta}\gamma\gamma\delta + C_{\delta\delta\delta}\delta\delta\delta \\
&\quad + C_{\alpha\beta\kappa}\alpha\beta\kappa + C_{\alpha\delta\kappa}\alpha\delta\kappa \\
&\quad + C_{\beta\gamma\kappa}\beta\gamma\kappa + C_{\gamma\delta\kappa}\gamma\delta\kappa \\
&\quad + C_{\beta\kappa\kappa}\beta\kappa\kappa + C_{\delta\kappa\kappa}\delta\kappa\kappa \quad .
\end{aligned} \tag{9.31}$$

Die Werte der Fehlerbahnen in einer bestimmten Ebene werden Fehlerkoeffizienten genannt.

Da $x_\alpha(z_s) = 0$ und $y_\delta(z_s) = 0$ gilt, vereinfachen sich die Ausdrücke für die Fehlerkoeffizienten in der Symmetrieebene zu

$$\begin{aligned}
C_{\mu\dots\nu}(z_s) &= -x_\gamma(z_s) \int_{z_e}^{z_s} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\mu\dots\nu} x_\alpha d\tilde{z} \quad , \\
C_{\eta\dots\xi}(z_s) &= y_\beta(z_s) \int_{z_e}^{z_s} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\eta\dots\xi} y_\delta d\tilde{z} \quad .
\end{aligned} \tag{9.32}$$

Die Werte einer Fehlerbahn in der Ebene z_f des virtuellen Austrittsquellbildes werden bestimmt, indem man die Fehlerbahn von der Ausgangsebene z_a des Monochromators in die virtuelle Ebene des Austrittsquellbildes zurückprojiziert. Dies ist in Abbildung 9.12 am Beispiel der Fehlerbahn $C_{\alpha\alpha}$ schematisch dargestellt.

Mit Hilfe der Beziehungen

$$x_\alpha(z_f) = 0 \quad , \quad x_\gamma(z_f) = 1 \quad , \quad y_\beta(z_f) = 0 \quad , \quad y_\delta(z_f) = -1 \quad (9.33)$$

erhält man

$$\begin{aligned} C_{\mu\dots\nu}(z_f) &= - \int_{z_e}^{z_a} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\mu\dots\nu} x_\alpha d\tilde{z} \quad , \\ C_{\eta\dots\xi}(z_f) &= \int_{z_e}^{z_a} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} k_{\eta\dots\xi} y_\beta d\tilde{z} \end{aligned} \quad (9.34)$$

für die Werte der Fehlerbahnen in der Ebene des virtuellen Austrittsquellbildes.

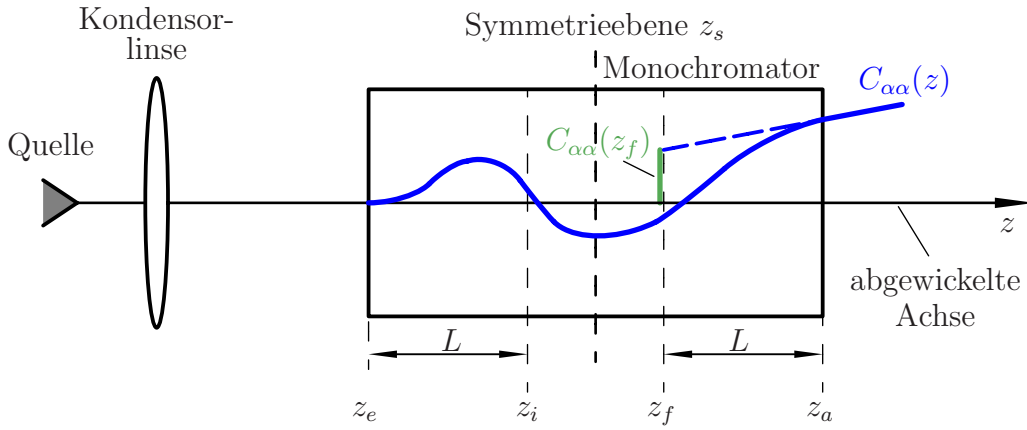


Abbildung 9.12: Fehlerbahn in der Ebene z_f des virtuellen Austrittsquellbildes.

Die Multipolmomente, die Fundamentalbahnen und alle Ableitungen dieser Größen verlaufen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch zur Symmetrieebene des Monochromators. Deshalb sind auch die Koeffizienten $k_{\mu\nu}$ und $k_{\eta\xi}$ der Polynome $\text{Re}\{s^{(2)}\}$ beziehungsweise $\text{Im}\{s^{(2)}\}$ entweder symmetrisch oder antisymmetrisch zur Symmetrieebene. Teilt man die Polynome in jeweils zwei Anteile mit symmetrischen beziehungsweise antisymmetrischen Koeffizienten auf

$$\begin{aligned} \text{Re}\{s^{(2)}\} &= \text{Re}\{s^{(2)}\}^{(+)} + \text{Re}\{s^{(2)}\}^{(-)} \quad , \\ \text{Im}\{s^{(2)}\} &= \text{Im}\{s^{(2)}\}^{(+)} + \text{Im}\{s^{(2)}\}^{(-)} \quad , \end{aligned} \quad (9.35)$$

so gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned}
\int_{z_e}^{z_a} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Re} \{s^{(2)}\}^{(+)} x_\alpha d\tilde{z} &= 0 \quad , \\
\int_{z_e}^{z_a} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Re} \{s^{(2)}\}^{(-)} x_\alpha d\tilde{z} &= 2 \int_{z_e}^{z_s} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Re} \{s^{(2)}\}^{(-)} x_\alpha d\tilde{z} \quad , \\
\int_{z_e}^{z_a} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Im} \{s^{(2)}\}^{(+)} y_\beta d\tilde{z} &= 2 \int_{z_e}^{z_s} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Im} \{s^{(2)}\}^{(+)} y_\beta d\tilde{z} \quad , \\
\int_{z_e}^{z_a} \sqrt{\frac{\Phi}{U}} \operatorname{Im} \{s^{(2)}\}^{(-)} y_\beta d\tilde{z} &= 0 \quad ,
\end{aligned} \tag{9.36}$$

zwischen den Fehlerintegralen bis zur Symmetrieebene und bis zur Ausgangsebene. Der Index (+) steht dabei für den symmetrischen, der Index (−) für den antisymmetrischen Anteil. In der Ebene z_f verschwinden daher aufgrund von (9.34) alle Fehlerbahnen im xz -Schnitt mit *symmetrischen* Koeffizienten $k_{\mu\dots\nu}^{(+)}$ und alle Fehlerbahnen im yz -Schnitt mit *antisymmetrischen* Koeffizienten $k_{\eta\dots\xi}^{(-)}$. Die übrigen Fehlerkoeffizienten zweiter Stufe hängen wegen (9.32), (9.34) und (9.36) über

$$\begin{aligned}
C_{\mu\dots\nu}(z_f) &= 2 \frac{C_{\mu\dots\nu}(z_s)}{x_\gamma(z_s)} \quad \text{im } xz\text{-Schnitt} \\
\text{und } C_{\eta\dots\xi}(z_f) &= 2 \frac{C_{\eta\dots\xi}(z_s)}{y_\beta(z_s)} \quad \text{im } yz\text{-Schnitt}
\end{aligned} \tag{9.37}$$

mit den Fehlerkoeffizienten in der Symmetrieebene z_s zusammen.

Die Korrektur mit Hilfe der Symmetrie funktioniert nicht für die Fehlerbahnen dritter Stufe, da in die Koeffizienten von $s^{(3)}$ auch die Fehlerbahnen zweiter Stufe eingehen. Diese weisen keine Symmetrie bezüglich der Symmetrieebene z_s des Monochromators mehr auf.

Skaliert man das realistische Design aus Abschnitt 9.5 soweit herunter, daß der Radius R_1 der SCOFF-Bahn des ersten Ablenkens Eins beträgt, erhält man die in Anhang C angegebenen normierten Fehlerkoeffizienten zweiter und dritter Stufe.

Die Bahnstörungen zweiter und dritter Ordnung für das realistische System mit von Eins verschiedenem Radius R_1 ergeben sich aus den normierten Fehlerkoeffizienten sowie den normierten Bahnparametern

$$\hat{\alpha} := \alpha \quad , \quad \hat{\gamma} := \frac{\gamma}{R_1} \quad , \quad \hat{\beta} := \beta \quad , \quad \hat{\delta} := \frac{\delta}{R_1} \quad , \quad \hat{\kappa} := \kappa \tag{9.38}$$

zu

$$\begin{aligned}
 x^{(2)} &= R_1 \left\{ \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}} \hat{\alpha} \hat{\alpha} + \dots \right\} , \\
 y^{(2)} &= R_1 \left\{ \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}} \hat{\alpha} \hat{\beta} + \dots \right\} , \\
 x^{(3)} &= R_1 \left\{ \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\alpha}} \hat{\alpha} \hat{\alpha} \hat{\alpha} + \dots \right\} , \\
 y^{(3)} &= R_1 \left\{ \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\beta}} \hat{\alpha} \hat{\alpha} \hat{\beta} + \dots \right\} .
 \end{aligned} \tag{9.39}$$

Mit Hilfe von (9.21), (9.25) und (9.19) läßt sich zeigen, daß für einen Strom von 100 nA in der Eingangsebene die Beträge der Bahnparameter $\hat{\alpha}, \hat{\gamma}, \hat{\beta}, \hat{\delta}$ durch

$$\begin{aligned}
 \max\{|\hat{\alpha}|\} &= \max\{|\hat{\beta}|\} = 1,72 \cdot 10^{-3} , \\
 \max\{|\hat{\gamma}|\} &= \max\{|\hat{\delta}|\} = 2,67 \cdot 10^{-6}
 \end{aligned} \tag{9.40}$$

beschränkt sind. Für die folgenden Betrachtungen nehmen wir eine Selektionsschlitzbreite von $3,2 \mu\text{m}$ an, was einer Energiebreite von 0,2 eV entspricht. Die Breite der Liniencrossover im Bereich des Schlitzes sollte möglichst klein gegenüber der Schlitzbreite sein. Dann ist sichergestellt, daß die gefilterte Energieverteilung scharfe Ränder besitzt (siehe Abschnitt 9.6). Im Bereich des Selektionsschlitzes beträgt die maximale relative Energieabweichung der Elektronen

$$\max\{|\hat{\kappa}|\} = \frac{0,1\text{eV}}{3000\text{V}} \approx 3,33 \cdot 10^{-5} \tag{9.41}$$

Im folgenden werden alle Fehlerkonstanten, die nur von den normierten Winkel $\hat{\alpha}$ und $\hat{\beta}$ abhängen, als Öffnungsfehlerkonstanten bezeichnet. Die maximal auftretenden normierten Winkeln sind um den Faktor 1000 größer als die maximal auftretenden normierten Achsabstände und um den Faktor 50 größer als die maximale relative Energieabweichung. In der Selektionsebene sind zudem sowohl für die zweite als auch die dritte Stufe die Öffnungsfehlerkonstanten deutlich größer als alle übrigen Fehlerkonstanten (siehe Anhang C). Für jede Stufe können daher alle noch von $\hat{\gamma}, \hat{\delta}$ oder $\hat{\kappa}$ abhängigen Fehler gegenüber den Öffnungsfehlern vernachlässigt werden. Der Beitrag der Öffnungsfehler dritter Stufe beträgt nur etwa 1% des Beitrages der Öffnungsfehler zweiter Stufe. Dies ist ein Indiz dafür, daß die Fehlerentwicklung konvergiert. Die größtmögliche Abweichung Δx von der paraxialen Abbildung im xz -Schnitt, die in der Selektionsebene auftreten kann, ist daher für einen Eingangsstrom von 100 nA in guter Näherung durch

$$\Delta x \approx R_1 \max\{|\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}} \hat{\alpha}^2|\} = 1,9 \mu\text{m} \tag{9.42}$$

gegeben. Die Breite des Liniencrossovers wächst aufgrund des Öffnungsfehlers um $2\Delta x$ auf etwa $3,8 \mu\text{m}$ an und ist somit von derselben Größenordnung wie

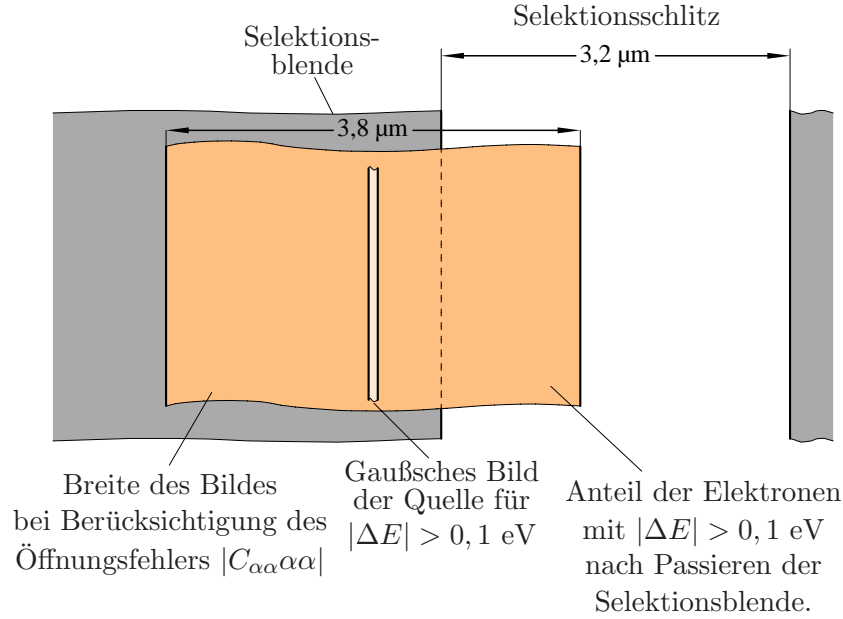


Abbildung 9.13: Breite eines Liniencrossovers unter Berücksichtigung des Öffnungsfehlers verglichen mit der Breite des Selektionsschlitzes.

die Breite des Selektionsschlitzes von $3,2 \mu\text{m}$. Dies ist nach dem Kriterium von Seite 117 tolerabel. Die Größenverhältnisse sind in Abbildung 9.13 dargestellt.

Bei einem Eingangsstrom von 10 nA hingegen beträgt die Linienverbreiterung mit $0,38 \mu\text{m}$ nur etwa ein Zehntel der Selektionsschlitzbreite. Die gefilterte Energieverteilung weist daher weit schärfere Ränder bei $\pm 0,1 \text{ eV}$ auf.

Die qualitativ schlechte Filterung bei 100 nA läßt sich nur durch eine Verringerung der Öffnungsfehlerkonstanten $\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}$ und $\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}$ zweiter Stufe in der Selektionsebene verbessern. Ohne die paraxiale Abbildung zu beeinflussen, können die Öffnungsfehlerkonstanten zweiter Stufe mit Hilfe von Hexapolfeldern beeinflusst werden. Da man *zwei* Öffnungsfehlerkonstanten $\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}$ und $\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}$ beeinflussen muß, benötigt man mindestens *zwei* frei einstellbare Hexapole. Die benötigten Hexapolfelder kann man entlang der Achse innerhalb der Ablenker durch entsprechende Formung der Elektrodenquerschnitte erzeugen, ohne daß dadurch zusätzliche Bauelemente nötig sind. Gibt man die normierten Hexapolmomente $\Phi_3^{(i)}$, $i = 1, 2$ für beide Ablenker vor, so lassen sich die zu ihrer Erzeugung notwendigen Elektrodenformen mit der in Abschnitt 5.3 beschriebenen Methode bestimmen.

Um einen guten Startwert für die notwendigen normierten Hexapolstärken $\hat{\Phi}_3^{(i)}$, $i = 1, 2$ beider Ablenker zu erhalten, geht man von den berechneten Öffnungsfehlern $C_{\alpha\alpha}$ und $C_{\beta\beta}$ des realistischen unkorrigierten Systems aus und überlagert im Inneren der Ablenker ein konstantes SCOFF–Hexapolfeld:

$$\hat{\Phi}_3^{(SCOFF)}(z) = \hat{\Phi}_3^{(i)} \cdot \begin{cases} 0 & : \text{außerhalb des Ablenkers} \\ 1 & : \text{innerhalb des Ablenkers} \end{cases}, \quad i = 1, 2 \quad . \quad (9.43)$$

Da die Fehlerkoeffizienten $C_{\alpha\alpha}$ und $C_{\beta\beta}$ linear von einem zusätzlichen konstanten Hexapolfeld abhängen (vergleiche Gleichungen (9.34) und (9.29)), erhält man den linearen Zusammenhang

$$\begin{aligned} \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}^{(Hex)}(z_s) &= \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}(z_s) + \hat{\Phi}_3^{(1)} A_1 + \hat{\Phi}_3^{(2)} A_2 \quad , \\ \hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}^{(Hex)}(z_s) &= \hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}(z_s) + \hat{\Phi}_3^{(1)} B_1 + \hat{\Phi}_3^{(2)} B_2 \quad , \end{aligned} \quad (9.44)$$

zwischen den normierten Öffnungsfehlerkoeffizienten ohne und mit SCOFF–Hexapolen innerhalb der Ablenker. Aus dem linearen Gleichungssystem $\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}^{(Hex)}(z_s) = 0$ und $\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}^{(Hex)}(z_s) = 0$ lassen sich die Schätzwerte für die normierten Multipolstärken unmittelbar bestimmen. Es handelt sich hierbei um eine Näherung, da dem durch die Einführung der Hexapole geänderten Randfeldverlauf im Vergleich zu Abbildung 9.6 nicht Rechnung getragen wird.

Verwendet man die so gewonnenen Hexapolstärken und die Parameter des realistischen unkorrigierten Systems für einen weiteren Iterationsprozeß zur Bestimmung des realistischen Design (siehe Abschnitt 9.4), so erhält man ein System mit um den Faktor 10 reduzierten Öffnungsfehlerkonstanten in der Selektionsebene.

Daher weist die Energieverteilung nach der Filterung des korrigierten Systems auch für einen Eingangsstrom von 100 nA noch scharfe Ränder auf. Wie im nächsten Abschnitt jedoch dargelegt ist, erfordert das korrigierte System eine weitaus präzisere Justierung der Quelle und der Stromselektionsblende.

In der Ebene des virtuellen Austrittsquellbildes sind die Öffnungsfehler zweiter Ordnung aufgrund der Monochromatorsymmetrie für jedes System korrigiert. Von den verbleibenden Fehlern dominieren die Beiträge der Farbfehler $\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\kappa}}\hat{\alpha}\hat{\kappa}$ und $\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\kappa}}\hat{\beta}\hat{\kappa}$:

$$\begin{aligned} \Delta x &\approx R_1 \max\{|\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\kappa}}\hat{\alpha}\hat{\kappa}|\} = 148,4 \text{ nm} \quad , \\ \Delta y &\approx R_1 \max\{|\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\kappa}}\hat{\beta}\hat{\kappa}|\} = 5,8 \text{ nm} \quad . \end{aligned} \quad (9.45)$$

Die Ausdehnung der virtuellen Quelle vergrößert sich damit in x –Richtung von 120 nm auf $120 \text{ nm} + 2\Delta x = 416 \text{ nm}$. Die Vergrößerung in y –Richtung ist hingegen

vernachlässigbar klein. Hierdurch vergrößert sich die effektive Quellfläche etwa um den Faktor vier. Der Richtstrahlwert hinter dem Monochromator beträgt daher ein Viertel des Richtstrahlwerts vor dem Monochromator, wenn man den Einfluß des Boersch-Effekts zunächst vernachlässigt. Dies ist weit unterhalb der zulässigen Reduzierung des Richtstrahlwerts im SÄTEM (vergleiche Kapitel 2).

9.8 Justiertoleranzen

In der Praxis ist es nicht möglich, die Quelle und die Stromselektionsblende beliebig genau relativ zum Monochromator zu positionieren.

Liegt das Zentrum der Quelle entlang der x -Achse versetzt in einem Abstand r von der Mikroskopachse, so liegt der Mittelpunkt des virtuellen Eintrittsquellbildes an der Position

$$\gamma_0 := -M \cdot r \quad (9.46)$$

außerhalb der Mikroskopachse, wobei M die Vergrößerung der Quelle in die Ebene des virtuellen Eintrittsquellbildes bezeichnet. Der Mittelpunkt des Akzeptanzintervalls (9.21) des Monochromators für den lateralen Abstand γ wird daher um γ_0 verschoben. Dies läßt sich berücksichtigen, indem man in allen Fehlerbahnen die Ersetzung

$$\gamma \rightarrow \gamma + \gamma_0 \quad (9.47)$$

vornimmt. Analog zu einem Quellversatz führt ein Versatz des Mittelpunktes der Stromselektionsblende in x -Richtung von der Achse weg zu einer Verschiebung des Mittelpunktes des Winkelakzeptanzbereichs für α (9.25) für die verschiedenen Ströme um einen Winkel α_0 . Dies wird durch die Ersetzung

$$\alpha \rightarrow \alpha + \alpha_0 \quad (9.48)$$

berücksichtigt. Die entsprechenden Dejustierungen entlang der y -Achse werden durch

$$\begin{aligned} \delta &\rightarrow \delta + \delta_0 \\ \beta &\rightarrow \beta + \beta_0 \end{aligned} \quad (9.49)$$

beschrieben. Eine Abweichung der Beschleunigungsspannung vom Sollwert U um den Wert ΔU bewirkt eine Verschiebung der relativen Energieabweichung κ eines Elektrons von der Sollenergie um $\kappa_0 = \Delta U/U$, was durch

$$\kappa \rightarrow \kappa + \kappa_0 \quad (9.50)$$

berücksichtigt wird.

Um zu untersuchen, welchen Einfluß diese Dejustierungen auf die Qualität der Filterung ausüben, betrachten wir zunächst nur die Fehlerbahnen zweiter Stufe. Es genügt, sich auf die Bahnstörung $x^{(2)}$ des xz -Schnitts zu beschränken, da in diesem Schnitt die Filterung erfolgt. Um die Betrachtung zunächst unabhängig von der gewählten Skalierung des Monochromators zu halten, gehen wir zu normierten Bahnparametern (9.38) und zu normierten Bahnstörungen (9.39) über.

Führt man die obigen Substitutionen im Polynom für die normierten Bahnstörungen $\hat{x}^{(2)}$ (9.31) durch, erhält man nach Ausmultiplizieren zusätzliche konstante und lineare Terme in $\hat{\alpha}, \hat{\gamma}, \hat{\beta}, \hat{\delta}$ und $\hat{\kappa}$. Der konstante Term weist die Struktur

$$\hat{X}_0(\hat{\alpha}_0, \hat{\gamma}_0, \hat{\beta}_0, \hat{\delta}_0) + \hat{X}_{\kappa_0}(\hat{\alpha}_0, \hat{\gamma}_0)\hat{\kappa}_0 + \hat{X}_{\hat{\kappa}_0\hat{\kappa}_0}\hat{\kappa}_0^2 \quad (9.51)$$

auf. Dieser Term gibt den Abstand an, um den das Spektrum in der Selektionsebene aufgrund der Dejustierungen verschoben ist. Da der Term von κ_0 abhängt, kann man die Lage des Spektrums im xz -Schnitt durch Variation der Beschleunigungsspannung verändern. Hiermit läßt sich auch ein lateral nicht exakt positionierter Selektionsschlitz ausgleichen.

Bei der Diskussion der linearen Terme ist zu beachten, daß die maximal auftretenden normierten Winkel $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ um den Faktor 1000 größer als die normierten Achsenabstände $\hat{\gamma}, \hat{\delta}$ und um den Faktor 50 größer als die relative Energieabweichung $\hat{\kappa}$ sind (siehe Seite 124).

Die Breite des Liniencrossovers in der Selektionsebene wird deshalb durch die Terme

$$\begin{aligned} & \hat{X}_{\hat{\alpha}}(\hat{\alpha}_0, \hat{\gamma}_0, \hat{\kappa}_0)\hat{\alpha} \quad \text{mit} \quad \hat{X}_{\hat{\alpha}}(\hat{\alpha}_0, \hat{\gamma}_0, \hat{\kappa}_0) = \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}\hat{\alpha}_0 + \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\gamma}}\hat{\gamma}_0 + \hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\kappa}}\hat{\kappa}_0 \\ \text{und} \quad & \hat{X}_{\hat{\beta}}(\hat{\beta}_0, \hat{\delta}_0)\hat{\beta} \quad \text{mit} \quad \hat{X}_{\hat{\beta}}(\hat{\beta}_0, \hat{\delta}_0) = \hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}\hat{\beta}_0 + \hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\delta}}\hat{\delta}_0 \end{aligned} \quad (9.52)$$

bestimmt. Die übrigen linearen Terme sind gegenüber diesen vernachlässigbar.

Der durch den ersten Term hervorgerufene Versatz ist proportional zum Startwinkel $\hat{\alpha}$ in der Ebene der virtuellen Eintrittsquelle. Dies entspricht einem Versatz, der entsteht, wenn die axiale Bahn x_{α} des xz -Schnitts in der Selektionsebene keine Nullstelle mehr besitzt. Der erste Term entspricht deshalb einer *Defokussierung* im xz -Schnitt. Die Gaußsche Bildebene fällt für diesen Schnitt nicht mehr mit der Selektionsebene zusammen sondern liegt davor oder dahinter. Um diesen Fehler auszugleichen muß man durch Änderung der Fokussierung der Kondensorlinse die Lage der Ebene des virtuellen Eintrittsquellbildes so verschieben, daß der Monochromator diese Ebene wieder in die Selektionsebene abbildet.

Der zweite Term erzeugt einen Versatz im xz -Schnitt abhängig von einer Änderung des Startwinkels im yz -Schnitt („45 Grad Astigmatismus“). Dieser Fehleranteil verkoppelt beide Schnitte und läßt sich nicht durch Fokussierung beseitigen. Es ist geplant, die Stromselektionsblende beim Bau des Monochromators piezoelektrisch verschiebbar auszulegen. Dann läßt sich die axiale Fehljustierung der Stromselektionsblende kompensieren und $\hat{\beta}_0 = 0$ kann eingestellt werden. Der noch verbleibende Versatz

$$\Delta x = R_1 \left\{ \hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\delta}} \hat{\delta}_0 \hat{\beta} \right\} \quad (9.53)$$

bestimmt dann die Justiertoleranzen des Systems. Wie man zeigen kann sind die aus der dritten Stufe der Fehlerentwicklung entstehenden Justierfehler gegenüber dem Einfluß der Bahnstörung zweiter Stufe vernachlässigbar.

Das System mit näherungsweise korrigiertem Öffnungsfehler weist einen etwa um den Faktor drei größeren normierten Fehlerkoeffizienten $\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\delta}}$ auf als das unkorrigierte System. Daher muß die Quelle im Falle des korrigierten Systems um den Faktor drei genauer positioniert werden als im Falle des unkorrigierten Systems. Für das unkorrigierte System aus Abschnitt 9.5 ergibt sich bei einer Vorvergrößerung von $M = 6$ und einem Eingangsstrom von 100 nA ein maximal zulässiger Versatz der Quelle von 46 μm von der Achse, wenn man für den Winkelstrom der Quelle 0,3 mA/srd annimmt. Für einen Eingangsstrom von 10 nA ist ein deutlich größerer Versatz von 148 μm zulässig. Das korrigierte System erlaubt hingegen nur Fehljustierungen der Quelle von 16 μm beziehungsweise 49 μm . Leider ist bislang nicht bekannt, wie genau man die Quelle justieren kann. Deshalb hat sich die CEOS GmbH zum Bau des unempfindlicheren unkorrigierten Systems entschieden.

Kapitel 10

Einfluß des Boersch–Effekts

10.1 Coulomb–Wechselwirkungen im Strahl

Bisher wurde angenommen, daß man die Coulomb–Wechselwirkung der Elektronen im Strahl untereinander vernachlässigen kann. Diese Annahme ist jedoch bei niedrigen Elektronenenergien von nur einigen keV insbesondere in der Umgebung von Strahlcrossovers nicht mehr gültig. Dort wird der mittlere Abstand der Elektronen sehr klein, und bei den niedrigen Energien verweilen die Elektronen aufgrund ihrer geringen Geschwindigkeit lange in der Wechselwirkungszone.

Um die Auswirkungen der Coulomb–Wechselwirkung zu verstehen, betrachten wir zunächst ein konvergentes, um die optische Achse rotationssymmetrisches Elektronenbündel im feldfreien Raum. In der Ebene des Strahlcrossovers weist der Strahl seinen kleinsten Durchmesser auf (siehe Abbildung 10.1). Wir greifen nun zwei Elektronen heraus, die vor Passieren des Crossovers die gleiche kinetische Energie besitzen und betrachten den Coulomb–Stoß in ihrem Schwerpunktsystem. Im Schwerpunktsystem haben die Geschwindigkeiten der beiden Elektronen stets den gleichen Betrag und zeigen in entgegengesetzte Richtung. Damit im Laborsystem beide Elektronen die gleiche Energie aufweisen, müssen ihre Geschwindigkeitsvektoren im Schwerpunktsystem senkrecht auf dem Vektor der Schwerpunktschwindigkeit stehen.

Durch den Stoß wird im Schwerpunktsystem zwar nicht der Betrag der Geschwindigkeitsvektoren geändert, wohl aber ihre Richtung. Transformiert man nach dem Stoß zurück ins Laborsystem, so weisen beide Teilchen *unterschiedliche* Energien auf. Ebenso hat sich der Winkel zur optischen Achse geändert, unter dem die

Teilchen die Crossoverebene verlassen. Dies ist in Abbildung 10.2 veranschaulicht.

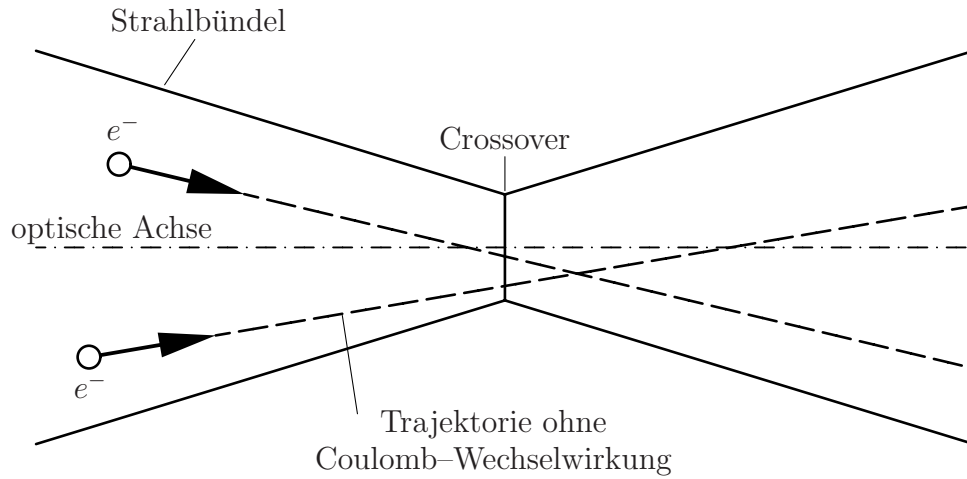


Abbildung 10.1: Stigmatischer Strahlcrossover im feldfreien Raum.

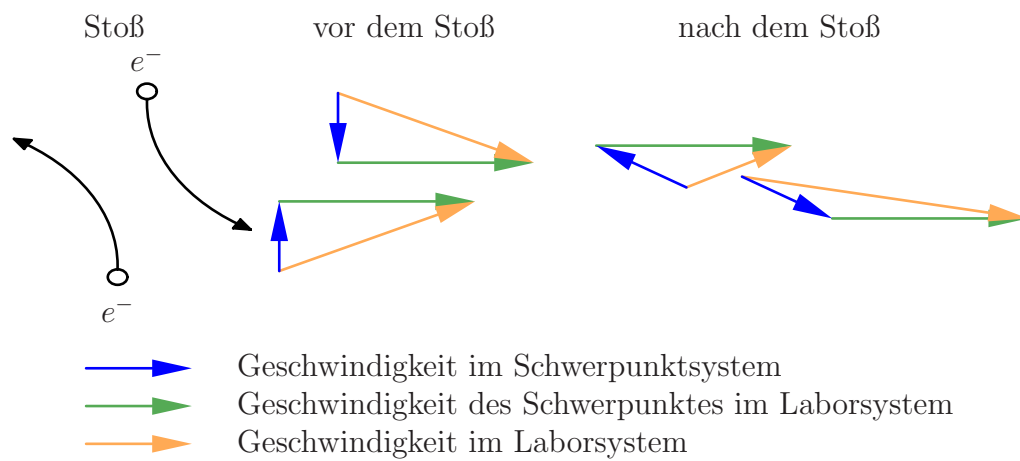


Abbildung 10.2: Energieübertrag und Winkelverkipfung durch den Boersch-Effekt.

Die Änderung der kinetischen Energie wird in der Literatur mit energetischem beziehungsweise longitudinale Boersch-Effekt bezeichnet. Die Winkelverkipfung heißt lateraler Boersch-Effekt.

10.1.1 Lateraler Boersch-Effekt

Da die Strahlverkipfung in unmittelbarer Umgebung des Crossovers erfolgt, ändern sich im wesentlichen nur die Winkel der Elektronen zur Achse nicht aber ihre Durchtrittsorte durch die Crossoverebene. Da die Crossover innerhalb des Monochromators in die Ebene des virtuellen Austrittsquelldbildes abgebildet werden, hat der laterale Boersch-Effekt nahezu keine Auswirkungen auf die Breite der virtuellen Quelle. Durch die Strahlverkipfung wird jedoch der Raumwinkel verändert, in welchen die Elektronen von der virtuellen Quelle emittiert werden. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 10.3 dargestellt.

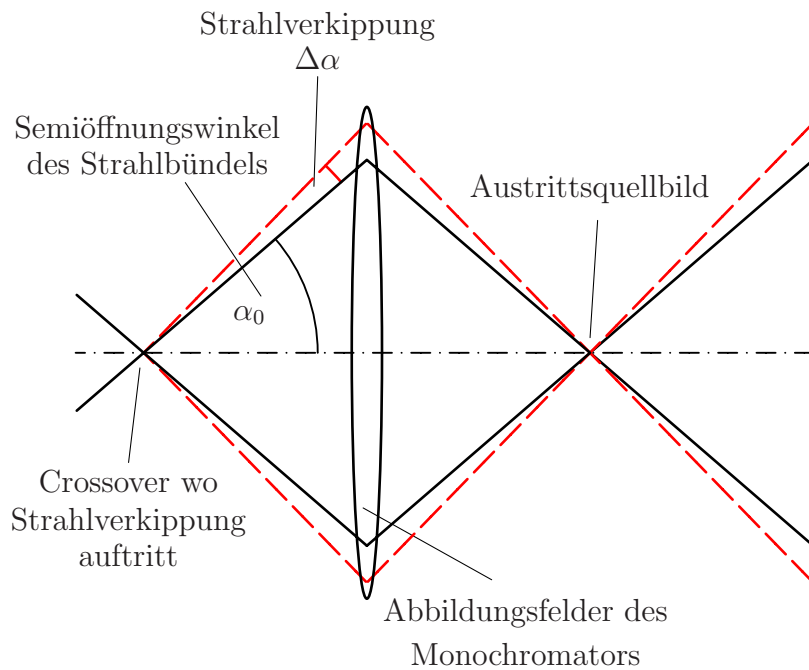


Abbildung 10.3: Veränderung des Emissionsraumwinkels durch Strahlverkipfung.

Mit Hilfe einer von Weidenhausen, Spehr und Rose [64] abgeleiteten analytischen Näherungsformel für *stigmatische* Crossover erhält man als Schätzwert für die

Wurzel der mittleren quadratischen Winkelverkipfung

$$\sqrt{\langle \Delta \alpha^2 \rangle} \approx 0,036 \cdot \alpha_0 \quad , \quad (10.1)$$

wenn man eine Beschleunigungsspannung von $U = 3$ kV, einen Strom von 100 nA, einen Crossoverdurchmesser von 120 nm und einen Semiöffnungswinkel des konvergenten Bündels von $\alpha_0 = 1,72$ mrad annimmt. Der Einfluß des lateralen Boersch-Effekts auf den Richtstrahlwert ist für diesen Crossover vernachlässigbar, da die Aufweitung des Emissionswinkels nur in der Größenordnung einiger Prozent liegt.

Die verwendeten Parameter stimmen mit dem konvergenten Bündel überein, daß für einen Eingangsstrom von 100 nA in den Monochromator eintritt (siehe Abschnitt 9.6). Da die realen Crossover im Inneren des Monochromators ähnliche Einstrahlwinkel bei einer deutlich verringerten Stromstärke aufweisen, stellt die obige Abschätzung eine obere Grenze für die Aufweitung des Emissionswinkels durch den Monochromator dar. Die Winkelverkipfung kann somit vernachlässigt werden.

10.1.2 Longitudinaler Boersch-Effekt

Verbreiterung der Energieverteilung

Theoretische Analysen zum longitudinalen Boersch-Effekt wurden von Rose und Spehr [65, 66] und von Jansen und Leeuwen [67, 68] für stigmatische und gekreuzte astigmatische Crossover im feldfreien Raum durchgeführt. Von Spehr wurden 1985 die abgeleiteten analytischen Abschätzungsformeln beider Arbeitsgruppen übersichtlich zusammengestellt [69].

Um eine Obergrenze für die Auswirkung des Boersch-Effekts auf die Energiebreite zu bestimmen, betrachten wir zunächst das stigmatische System von Rose [16]. Aufgrund der geringeren Stromstärken in den astigmatischen Zwischenbildern ist der longitudinale Boersch-Effekt des im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Monochromatortyps auf alle Fälle kleiner als der des Systems von Rose.

Wie in Abschnitt 9.6 gezeigt wurde, entspricht ein Strom von 100 nA bei einer Vorvergrößerung der Quelle von $M = 6$ einem Semiöffnungswinkel des konvergenten Bündels von $\alpha_{max} = 1,72$ mrad. Hierbei wurde ein Winkelstrom der Quelle von $j_\Omega = 0,3$ mA/srd angenommen. Der Durchmesser d_Q des virtuellen Eintritts-
quellbildes beträgt 120 nm für einen effektiven Quelldurchmesser von 20 nm. Wählt man den ersten und den zweiten Halbkugelkondensator des Systems von

Rose gleich groß, so weist das reelle Bild der Quelle in der Selektionsebene den gleichen Durchmesser und den gleichen Semikonvergenzwinkel auf. Für die Wurzel aus dem Erwartungswert der quadrierten Energieabweichung erhält man mit den Formeln von Spehr und Rose

$$\sqrt{\langle(\Delta E)^2\rangle} \approx 0.72 \text{ eV} \quad . \quad (10.2)$$

Wie von Spehr und Rose gezeigt wurde, weist die Energieverteilung durch den Boersch-Effekt einen sehr breiten Sockel auf, da ein geringer Anteil der Elektronen sehr stark gestreut wird. Diese Elektronen tragen aufgrund der Quadrierung der Energieabweichung zu $\sqrt{\langle(\Delta E)^2\rangle}$ überproportional stark bei. Sinnvoller erscheint hingegen die Angabe eines Energieintervalls $\Delta E_{n\%}$, innerhalb dessen sich $n\%$ aller Elektronen befinden. Sowohl von Spehr und Rose als auch von Jansen et. al. wurden analytische Näherungsformeln für $\Delta E_{50\%}$ hergeleitet. Man erhält die Werte

$$\begin{aligned} \Delta E_{50\%}^{(Spehr)} &\approx 0,28 \text{ eV} \quad , \\ \Delta E_{50\%}^{(Jansen)} &\approx 0,20 \text{ eV} \quad . \end{aligned} \quad (10.3)$$

Zieht man den breiten Sockel der sehr stark gestreuten Elektronen ab, so ist der Verteilung näherungsweise gaußförmig. Für eine Gaußverteilung ergibt sich die Halbwertsbreite $\Delta E_{1/2}$ (FWHM) zu

$$\Delta E_{1/2} \approx 1,75 \Delta E_{50\%} \quad . \quad (10.4)$$

Man erhält somit die Abschätzungen

$$\begin{aligned} \Delta E_{1/2}^{(Spehr)} &\approx 0,49 \text{ eV} \quad , \\ \Delta E_{1/2}^{(Jansen)} &\approx 0,35 \text{ eV} \end{aligned} \quad (10.5)$$

für die Halbwertsbreite der Energieverteilung durch den Boersch-Effekt im Crossover in der Selektionsebene für den Monochromator von Rose.

Die Halbwertsbreite der Energieverteilung (FWHM) durch den Boersch-Effekt ist deutlich größer als die angestrebte Breite der Verteilung in der Ausgangsebene. Der Effekt der Filterung wird somit im Rahmen der verwendeten analytischen Näherung durch den Boersch-Effekt wieder zunichte gemacht.

Bei dieser Betrachtungsweise wurde jedoch der Einfluß der Dispersion in der Filterebene vernachlässigt, durch die die stigmatischen Quellbilder nach der Energie sortiert auseinandergezogen werden. Hierdurch sinkt die Stromdichte in der Selektionsebene und ein verringerter Boersch-Effekt ist zu erwarten. Leider existieren jedoch keine analytischen Näherungsformeln für diesen Fall, so daß keine Aussage möglich ist, ob die zu erwartende Reduktion des Boersch-Effekts groß genug

ausfällt, um noch eine Filterung auf ein FWHM von 0,2 eV bei einem Strom in der Eintrittsebene von 100 nA zu ermöglichen. Um eine genauere Abschätzung des Boersch-Effekts zu erhalten, die auch die Wirkungen der ablenkenden Felder und der dispersiven Bahn mit einschließt, ist eine Monte-Carlo Simulation notwendig.

Bei einem Eingangsstrom von 10 nA erhält man als Abschätzungen für die Halbwertsbreiten der Energieverteilung

$$\begin{aligned}\Delta E_{1/2}^{(Spehr)} &\approx 0,1 \text{ eV} \quad , \\ \Delta E_{1/2}^{(Jansen)} &\approx 0,07 \text{ eV} \quad .\end{aligned}\tag{10.6}$$

Durch den longitudinalen Boersch Effekt kann somit die Halbwertsbreite der Energieverteilung nach der Filterung von 0,2 eV höchstens auf

$$\Delta E_{1/2} \approx \sqrt{0,2^2 + 0,1^2} \text{ eV} = 0,22 \text{ eV} \tag{10.7}$$

anwachsen. Die Energieverbreiterung durch den longitudinalen Boersch-Effekt ist daher bei solch kleinen Strahlströmen vernachlässigbar.

Vergrößerung der Quellfläche

Die Energieverbreiterung durch den Boersch-Effekt kann nicht nur die Energiefilterung wieder zunichte machen, sondern auch die Fläche der virtuellen Quelle in der Quellaustrittsebene des Monochromators deutlich vergrößern, was einen Richtstrahlwertverlust zur Folge hat.

Der Monochromator ist so konstruiert, daß die dispersive Bahn hinter der Ausgangsebene identisch verschwindet. Ein Elektron, daß mit einer Energieabweichung ΔE von der Sollenergie entlang der optischen Achse in den Monochromator eintritt, tritt auch wieder entlang der optischen Achse aus dem System aus (Abbildung 10.4). Hierdurch wird eine Aufweitung des Quellbildes durch Dispersion vermieden, allerdings nur unter der Voraussetzung, daß die Energie der Elektronen *entlang ihrer Flugbahnen konstant bleibt*.

Erfolgt zwischen zwei Elektronen eine Coulomb-Streuung beim Durchtritt durch ein Zwischenbild der Quelle, so ändern dort beide ihre Energie. Dadurch fliegen die Elektronen nicht mehr entlang ihrer Solltrajektorien sondern entlang von parasitären dispersiven Bahnen. Eine solche Bahn startet vom Ort des Stoßes aus mit der Richtung der Solltrajektorie. Sie verschwindet im Gegensatz zur dispersiven Bahn des Monochromators hinter der Ausgangsebene *nicht*. Dies ist in Abbildung 10.4 skizziert.

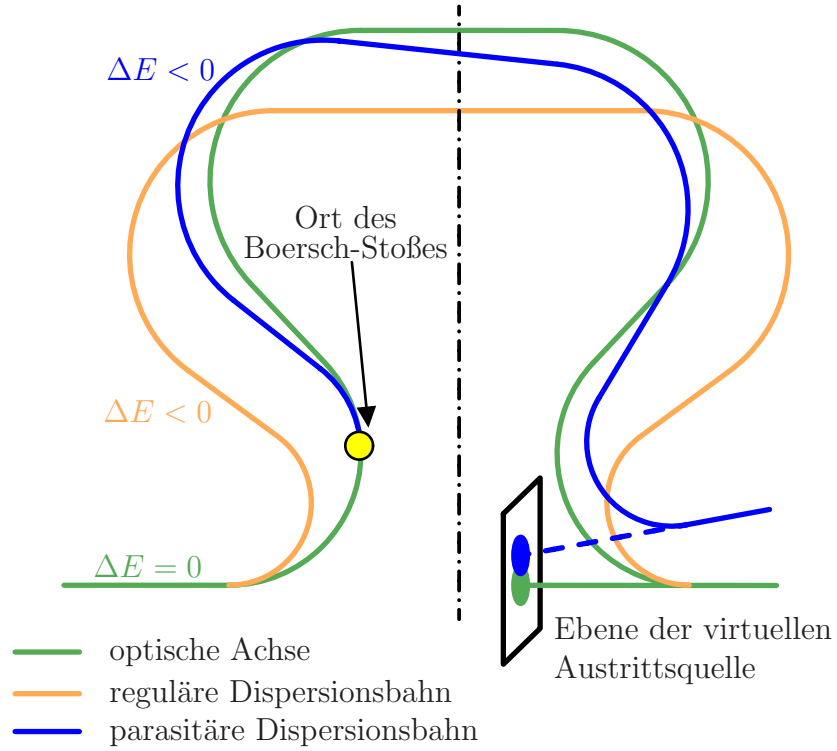


Abbildung 10.4: Vergrößerung der Fläche der virtuellen Austrittsquelle durch den longitudinalen Boersch-Effekt.

Die zu einem Zwischenbild in der Ebene z_p gehörende parasitäre dispersive Bahn $x_\kappa^{(p)}$ läßt mit Hilfe der Linearkombination

$$x_\kappa^{(p)} = x_\kappa + \alpha^{(p)} x_\alpha + \gamma^{(p)} x_\gamma \quad (10.8)$$

aus der dispersiven Bahn und den Fundamentalbahnen des xz -Schnitts bestimmen. Die Koeffizienten $\alpha^{(p)}$ und $\gamma^{(p)}$ ergeben sich aus den Bedingungen

$$x_\kappa^{(p)}(z_p) = 0 \quad \text{und} \quad x_\kappa^{(p)'}(z_p) = 0 \quad . \quad (10.9)$$

Das virtuelle Austrittsquellbild von Elektronen, die durch den Boersch-Effekt eine Energieänderung um $\Delta E^{(B)}$ erfahren, besitzt den Abstand $\Delta E^{(B)} \cdot x_\kappa^{(p)}(z_f)$ von der optischen Achse (Abbildung 10.5). Die mittlere Emissionsrichtung dieses Quellbildes ist dabei gegenüber der optischen Achse um den Winkel $x_\kappa^{(p)'}(z_f)$ verkippt.

Die Verbreiterung der Quelle im xz -Schnitt wird durch die Halbwertsbreite der Energieverteilung aufgrund des Boersch-Effekts *und* den Wert der parasitären

dispersiven Bahn in der Ebene des Austrittsquellbildes bestimmt. Ein Design

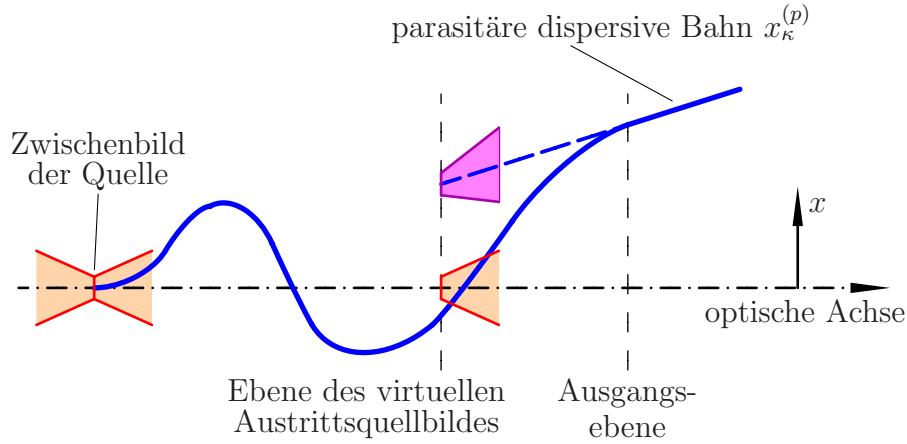


Abbildung 10.5: Zusammenhang zwischen der parasitären dispersiven Bahn und der Position und Emissionsrichtung des virtuellen Quellbildes.

sollte deshalb nur so groß gewählt werden, daß der Selektionsschlitz von seiner Breite her noch problemlos realisiert werden kann. Ein System größer zu wählen ist nicht sinnvoll, selbst wenn die bautechnischen Randbedingungen dies zulassen sollten. Zusammen mit der Dispersion in der Selektionsebene nehmen nämlich auch die parasitären Dispersionen in der Ebene des Austrittsquellbildes linear mit der absoluten Größe des Monochromators zu.

Für das in Abschnitt 9.5 vorgestellte unkorrigierte System erhält man für die vier Liniencrossover bis zur Selektionsebene die in Tabelle 10.1 angegebenen parasitären Orts- und Winkeldispersionen in der Ebene der virtuellen Austrittsquelle. Die Crossover sind dabei nach der Reihenfolge ihres Auftretens von der Eingangsebene aus durchnummeriert. Der vierte Crossover liegt in der Selektionsebene. Die Ortsdispersion D_r und die Winkeldispersion D_α sind mit der parasitären dispersiven Bahn des normierten Systems über

$$D_r = \frac{\hat{x}_\kappa^{(p)}(\hat{z}_f) R_1}{U} \quad \text{und} \quad D_\alpha = \frac{\hat{x}_\kappa^{(p)'}(\hat{z}_f)}{U} \quad (10.10)$$

verknüpft. Es genügt, sich auf die Crossover bis zum Selektionsschlitz zu beschränken, da aufgrund des stark verringerten Strahlstroms hinter der Selektionsebene der Beitrag der Crossover hinter dem Selektionsschlitz gegenüber dem Beitrag der Crossover in der ersten Hälfte des Monochromators vernachlässigt werden kann.

Eine Abschätzung für die größte überhaupt mögliche Aufweitung des Emissionswinkels der virtuellen Austrittsquelle durch die parasitäre Winkeldispersion ist

Crossover	$D_r \left[\frac{\mu\text{m}}{\text{eV}} \right]$	$D_\alpha \left[\frac{\text{mrad}}{\text{eV}} \right]$
1	14,3	0,12
2	-10,0	0,06
3	-6,6	0,16
4	-25,9	0,12

Tabelle 10.1: Parasitäre Orts- und Winkeldispersionen des unkorrigierten Systems der vier Liniencrossover bis zum Selektionsschlitz.

durch

$$\Delta\alpha_{max} \approx \Delta E_{1/2}^{(Spehr)} \cdot D_\alpha^{(3.Crossover)} = 0,08 \text{ mrad} \quad (10.11)$$

gegeben. Dies ist gegenüber einem Semiöffnungswinkel des Quellbündels von 1,72 mrad vernachlässigbar. Der Emissionswinkel der Quelle bleibt somit durch die auftretenden Winkeldispersionen nahezu unbeeinflusst.

Das Quellbild für Elektronen, die durch den Boersch-Effekt eine Energieverschiebung von nur 0,05 eV erfahren, liegt hingegen bereits in einem Abstand von

$$\Delta d \approx 0,05 \text{ eV} \cdot 25,0 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}} = 1250 \text{ nm} \quad (10.12)$$

von der optischen Achse entfernt, wenn der Energieübertrag im Crossover der Selektionsebene erfolgt ist. Dies ist etwa das zehnfache des Quellbilddurchmessers ohne Berücksichtigung des Boersch-Effekts. Nimmt man für die Verteilung der Energieabweichungen durch den Boersch-Effekt eine Halbwertsbreite von 0,05 eV an, führt das zu einer Vergrößerung der Quellfläche um eine Größenordnung. Hierdurch wird auch der Richtstrahlwert um den Faktor 10 kleiner. Die Vergrößerung der Quellfläche ist somit der begrenzende Effekt. Da die Quellfläche nur im xz -Schnitt verbreitert wird, ist hinter dem Monochromator ein Stigmator notwendig um die linienförmig aufgezogene Quelle wieder zu stigmatisieren.

Um eine möglichst genaue Abschätzung für die Vergrößerung der Quellfläche zu erhalten, ist eine realistische quantitative Abschätzung der Größe des Boersch Effekts mit Hilfe einer Monte-Carlo Simulation notwendig, die auch die Ablenkerfelder und die Dispersion entlang des Weges berücksichtigt. Die in Abschnitt 10.1.2 mit Hilfe von analytischen Näherungsformeln durchgeführte „worst case“ Abschätzung genügt hier nicht.

10.2 Monte–Carlo Simulation

10.2.1 Erzeugung des Elektronenensembles

Man erzeugt mit Hilfe eines Zufallsgenerators zunächst ein Ensemble von N Elektronen vor der Eintrittsebene des Monochromators. Die Elektronen werden dabei innerhalb eines konusförmigen Volumens verteilt, das einem Ausschnitt des konvergenten Bündels vor Eintritt in den Monochromator entspricht (Abbildung 10.6).

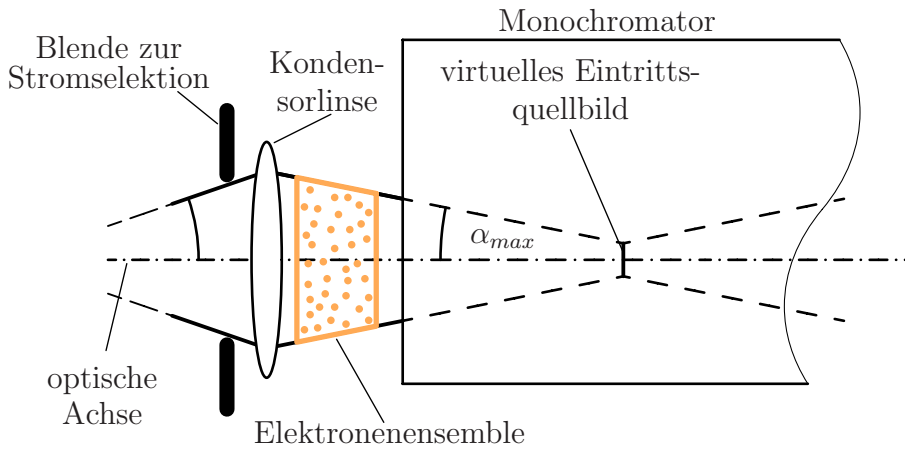


Abbildung 10.6: Geometrie eines Elektronenensembles vor Eintritt in den Monochromator.

Die Orte der Elektronen innerhalb des Konus werden mit Hilfe eines Zufallsgenerators nach der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(x, y, z) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta l A(z)} & : \text{innerhalb des Konusvolumens} \\ 0 & : \text{außerhalb des Konusvolumens} \end{cases} \quad (10.13)$$

erzeugt, wobei $A(z)$ für die Querschnittsfläche des Konus an der Achsenposition z steht (Abbildung 10.7) und Δl die Länge des Konus bezeichnet. Diese Verteilung entspricht einem homogen ausgeleuchteten Raumwinkel bei zeitlich konstantem Strom. Die Richtung der Geschwindigkeit der Elektronen wird per Zufallsgenerator so gewählt, daß ihre Trajektorien durch das virtuelle Bild der Quelle verlaufen. Die Durchtrittsorte durch das virtuelle Quellbild wählt man gleichverteilt. Für

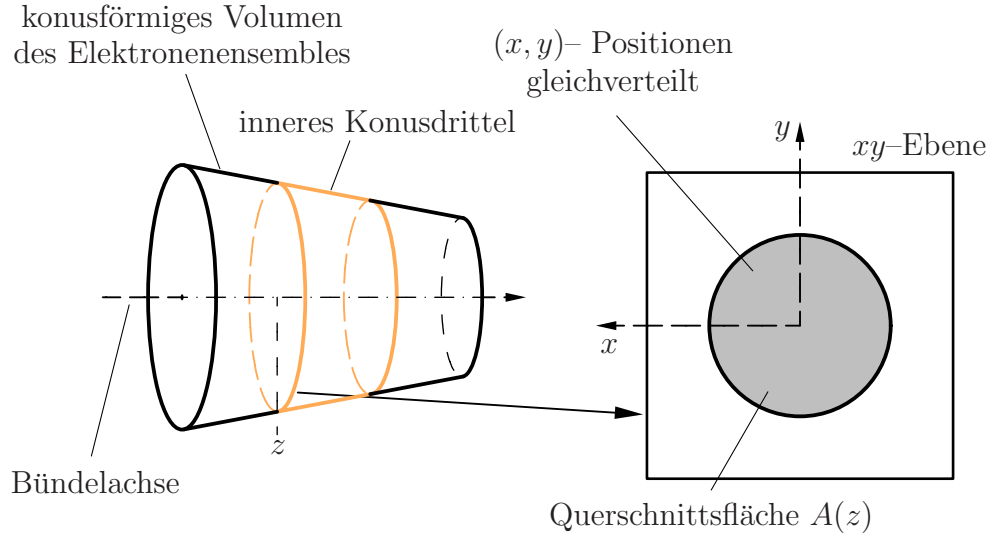


Abbildung 10.7: Räumliche Verteilung des Elektronenensembles.

die Energie der Elektronen wird eine Gaußverteilung mit einer Halbwertsbreite (FWHM) von 0,7 eV und einem Mittelwert von $E_0 = eU$ angenommen.

Der Semikonvergenzwinkel des Bündels sowie der Durchmesser der virtuellen Quelle wird wie auf Seite 118 beschrieben aus dem Winkelstrom j_Ω der Quelle, dem gewünschten Eingangsstrom I_e in den Monochromator, dem Durchmesser der Quelle und der Vorvergrößerung M bestimmt. Die Länge Δl des Konus erhält man für eine vorgegebene Anzahl N von Elektronen aus dem Strahlstrom I_e und der Beschleunigungsspannung U :

$$\Delta l = \frac{Ne\langle v \rangle}{I_e} \quad \text{mit} \quad \langle v \rangle = \sqrt{\frac{2eU}{m_0}} \quad . \quad (10.14)$$

Hierbei ist $\langle v \rangle$ die Geschwindigkeit von Elektronen der Sollenergie.

Die im realen Strahl vorhandenen Elektronen vor und hinter den Stirnflächen des Konus werden nicht mitberücksichtigt. Daher fehlen den Elektronen in der Umgebung der Stirnflächen Stoßpartner. Dies führt in der Energieverteilung zu unrealistischen Artefakten. Aus diesem Grund werden bei der Energiestatistik nur Elektronen berücksichtigt, die sich im inneren Konusdrittel befinden (Abbildung 10.7). Um N für die Energiestatistik relevante Elektronen zu erhalten, muß man daher ein Ensemble von $3N$ Elektronen durch den Monochromator hindurchpropagieren.

Um den Boersch-Effekt so realistisch wie möglich zu simulieren, muß man dieses Ensemble unter Beachtung der Coulomb-Wechselwirkung aller Elektronen untereinander durch die mit Hilfe der Ladungssimulation gewonnenen realen Felder des Monochromators bis zur Selektionsebene hindurchpropagieren.

Leider ist die Bestimmung der elektrischen Felder im Falle des in Kapitel 8 vorgestellten Verfahrens zur Ladungssimulation sehr zeitintensiv. Es ist mit vertretbarem Rechenaufwand nicht möglich, ein Ensemble von mehreren Hundert Elektronen bis zur Mittelebene hindurchzupropagieren. Soviele Elektronen sind jedoch für eine ausreichende Statistik der Energieverteilung notwendig. Daher wird die Simulation des Boersch-Effekts nur für die ersten drei astigmatischen Crossover unter Annahme eines vereinfachten Feldmodells durchgeführt.

10.2.2 Vereinfachtes Feldmodell

Durch die Wahl des Umlenk winkels $\phi = 2\pi$ geht der erste Ablenker in einen torusförmigen Ablenker über. Für das rotationssymmetrische Feld eines Toroidablenkers existiert die Reihenentwicklung 5.4 um die SCOFF-Achse, die eine wesentlich schnellere Bestimmung des elektrischen Feldes erlaubt als die Ladungssimulation. Da die ersten beiden Crossover innerhalb des Feldes des ersten Ablenkers liegen (siehe Abbildung 9.8), läßt sich eine gute Abschätzung für den longitudinalen Boersch-Effekt innerhalb dieser Crossover gewinnen, indem man das Elektronenensemble durch das Feld des torusförmigen Ablenkers propagiert.

Da der Toroidablenker keine Eintrittsfläche aufweist, ist es nicht möglich, das im vorigen Kapitel beschriebene konusförmige Elektronenensemble vom feldfreien Raum aus in den Ablenker hineinzupropagieren. Um eine vernünftige Startverteilung für die Propagation durch den Toroidablenker zu gewinnen, erzeugt man zunächst ein konusförmiges Elektronenensemble, dessen hintere Stirnfläche mit der Ebene der Eintrittskante des ersten Ablenkers zusammenfällt (Abbildung 10.8). Dieses Ensemble entspricht einem Ausschnitt des Strahls bei ausgeschaltetem Monochromator. Durch die Felder des ersten Ablenkers wird die Geometrie dieses Strahlabschnitts verformt.

Um die Positionen \vec{r}_i der Elektronen bei *eingeschaltetem* Ablenker näherungsweise zu berechnen, bestimmt man zunächst die laterale Position und die Richtung, die die Elektronen des konusförmigen Ensembles bei Passieren der Ebene der Eintrittskante innehatten. Anschließend ermittelt man mit Hilfe der Fundamentalbahnen und der dispersiven Bahn des Ablenkers die von diesen Positionen aus startenden Trajektorien der Elektronen in linearer Näherung. Hierbei ist es sinnvoll, die SCOFF-Näherung zu verwenden, da hierfür die Bahnen analytisch

bekannt sind. Mit Hilfe der Trajektorien bestimmt man die Orte und Geschwindigkeiten der Elektronen bei eingeschaltetem Feld (Abbildung 10.8).

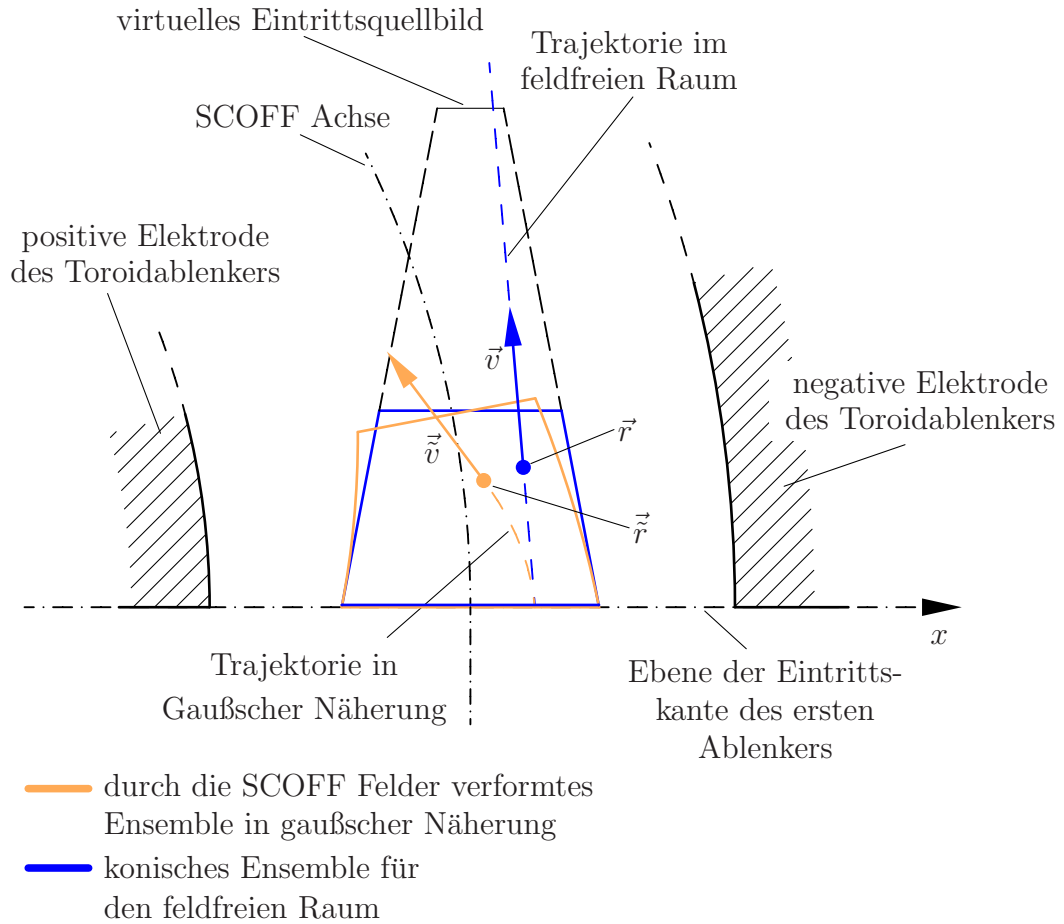


Abbildung 10.8: Erzeugung des Startensembles aus dem konusförmigen Ensemble für den feldfreien Raum.

Der Betrag der Geschwindigkeit \tilde{v} eines Elektrons bei eingeschaltetem Ablenkerfeld läßt sich aus seiner Gesamtenergie und seiner Position \vec{r} mit Hilfe der Beziehung

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}m_0\tilde{v}^2 - e\varphi(\vec{r}) \quad (10.15)$$

bestimmen.

Zur Propagation des Elektronenensembles durch das Feld des Toroidablenkers wird der in [60] beschriebene Differentialgleichungslöser achter Ordnung mit Schrittweitensteuerung von Dormand & Prince verwendet. Dabei wird die Coulomb– Wechselwirkung zwischen den Elektronen berücksichtigt.

Die Energieabweichung eines Elektrons aufgrund des Boersch–Effekts ist die Differenz zwischen der Gesamtenergie E_f des Elektrons am Ende und der Gesamtenergie E_i am Anfang der Propagation

$$\Delta E = E_f - E_i \quad . \quad (10.16)$$

10.2.3 Vergleich zwischen stigmatischem und astigmatischem Strahlengang

Mit Hilfe des im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Verfahrens wurde der Boersch–Effekt für einen Toroidablenker mit astigmatischem und einen Toroidablenker mit stigmatischem Strahlengang für Eingangsströme im Bereich von 10 nA bis zu 100 nA untersucht. Hierbei wurden die Simulationen für jeden Stromwert fünfmal mit jeweils unterschiedlichen Startwerten für den Zufallsgenerator wiederholt.

Im astigmatischen Fall wurde die Brechkraft μ_1 im xz –Schnitt vom ersten Ablenker des in Abschnitt 9.5 vorgestellten Systems verwendet. Im Falle des stigmatistischen Ablenkers gilt $\mu = 1$.

Es wurden $N = 500$ statistische relevante Elektronen pro Simulation gewählt. Die Elektronen wurden soweit durch den jeweiligen Toroidablenker propagiert, daß im Falle der stigmatistischen Abbildung zwei Crossover und im Falle der astigmatistischen Abbildung drei Crossover berücksichtigt wurden (siehe Abbildungen 10.9 und 10.10). Dies entspricht der Anzahl der Crossover vor der Selektionsebene im System von Abschnitt 9.5 beziehungsweise im stigmatistischen Design von Rose (siehe Abschnitt 3.1.3).

Im astigmatischen Fall stimmt im Gegensatz zu den ersten beiden Crossovern die Lage des dritten Crossovers im Toroidablenker nicht mehr mit der Lage des dritten Crossovers des realen Systems überein. Im realen System liegt dieser Crossover bereits innerhalb des zweiten Ablenkers und ist deutlich weiter vom zweiten Crossover entfernt (vergleiche Abbildungen 9.8 und 10.9). Hierdurch ist die Stromdichte in der Zwischenzone niedriger als bei der Simulation. Daher ist für

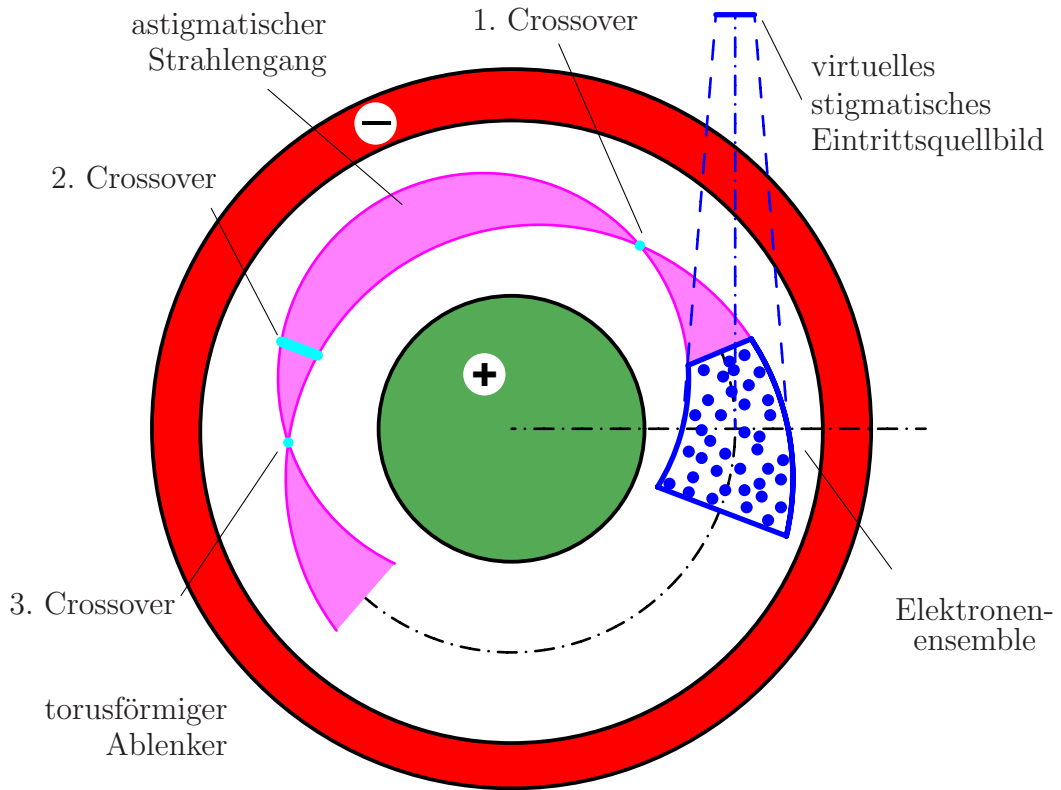


Abbildung 10.9: Propagation durch einen Toroidablenker mit astigmatischem Strahlengang.

das reale System ein etwas reduzierter Boersch-Effekt zu erwarten.

Die Breite $\Delta E_{50\%}$ der Verteilung der Energieabweichungen ΔE von der Startenergie (10.16), innerhalb derer 50 % aller Elektronen liegen, ist in Abbildung 10.11 für den stigmatischen und den astigmatischen Fall über dem Strom in der Eingangsebene aufgetragen. Für die Hälfte der statistisch relevanten Elektronen gilt

$$\Delta E \in [-\Delta E_{50\%}/2, \Delta E_{50\%}/2] \quad . \quad (10.17)$$

Man erkennt, daß ein stigmatisches Design für hohe Eingangsströme im Bereich von 50 nA bis zu 100 nA einen nahezu doppelt so großen Boersch-Effekt aufweist als ein astigmatisches. Für niedrige Eingangsströme (10 nA bis 20 nA) hingegen

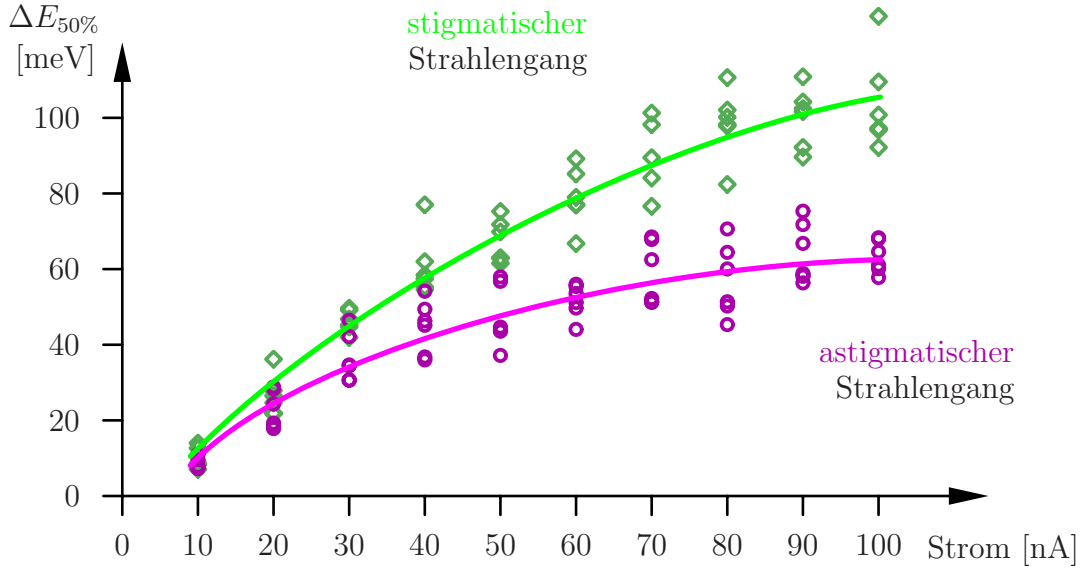


Abbildung 10.11: Breite des Bereichs der Verteilung der Energieabweichungen, in dem 50 % der Elektronen liegen, aufgetragen über dem Eingangsstrom.

Nimmt man dennoch an, daß ein Boersch-Effekt von der gleichen Größenordnung wie in den drei ersten Crossovers auch in der Selektionsebene auftritt, so erhält man als „worst-case“ Abschätzung für die Breite $d_x^{(B)}$ der Quelle bei Berücksichtigung der parasitären Dispersionen

$$d_x^{(B)} = 1,75 \cdot \Delta E_{50\%}^{(astigm)} \cdot D_r^{(4.Crossover)} + d_Q + 2\Delta x \quad , \quad (10.18)$$

wobei d_Q den Durchmesser der virtuellen Quelle bei idealer Gaußscher Abbildung bezeichnet. Die zusätzliche Verbreiterung der virtuellen Quelle durch die Bildfehler zweiter Stufe beträgt dabei das doppelte der maximal möglichen Abweichung Δx eines Strahlelektrons von der Gaußschen Bahn aufgrund der Bildfehler zweiter Ordnung (siehe Abschnitt 9.7). Der Faktor 1,75 dient zur Umrechnung von $\Delta E_{50\%}$ auf die Halbwertsbreite $\Delta E_{1/2}$ (siehe Gleichung (10.4)), da die Verteilung nahezu gaußförmig ist.

Für einen Strom in der Eingangsebene von 100 nA und den in Abschnitt 9.6 angenommenen Werten für die Vorvergrößerung und den Winkelstrom erhält man eine Zunahme der Fläche der virtuellen Quelle um den Faktor 26. Realistischer dürfte die Annahme sein, daß der Boersch-Effekt im Selektionscrossover klein gegenüber dem Effekt der ersten drei Crossover ist, so daß anstelle der parasitären Ortsdispersion des Selektionscrossovers die kleinere parasitäre Ortsdispersion des

ersten Crossovers zur Abschätzung verwendet werden kann. In diesem Fall ergibt sich eine Vergrößerung der Quellfläche um den Faktor 16.

Das System von Rose weist bei einer dem astigmatischen Design vergleichbaren Baulänge von 6 cm (Abstand zwischen der Eingangsebene des ersten zur Ausgangsebene des vierten Halbkugelkondensators) eine Dispersion in der Selektionsebene von $40 \mu\text{m}/\text{eV}$ auf, sofern die Radien der Halbkugelkondensatoren gleichgroß gewählt werden. Bei dieser Wahl beträgt die parasitäre Restdispersion des stigmatischen Selektionscrossovers in der Ebene der virtuellen Austrittsquelle ebenfalls $40 \mu\text{m}/\text{eV}$. Als „worst case“ Abschätzung erhält man eine Vergrößerung der Quellfläche um etwa den Faktor 60. Um denselben Faktor wie das astigmatische Design zu erreichen, muß man den Monochromator von Rose auf eine Baulänge von 2,4 cm verkleinern. Hierdurch wachsen aber auch die Anforderungen an die Justiergenauigkeit der einzelnen Elemente sowie an die Justiergenauigkeit der Quelle und des Kondensorsystems gegenüber dem Monochromator. Da bislang nur SCOFF-Rechnungen zu diesem Design vorliegen, ist auch nicht bekannt, welchen Abstand man zwischen den Elektroden des ersten und denen des zweiten Halbkugelkondensators zulassen darf. In diesen Zonen lassen sich möglicherweise sehr hohe Spitzenfeldstärken bei der Realisierung des Designs nicht vermeiden, da sich im Rahmen der SCOFF-Näherung die Elektroden berühren. Jede Verkleinerung des Designs erhöht die Spitzenfeldstärken und verschärft damit diese Problematik.

Für einen Strom in der Eingangsebene von 10 nA, wie er für den Einsatz im SÄTEM benötigt wird, erhält man im Falle des astigmatischen Systems als „worst case“ Abschätzung eine Vergrößerung der Quellfläche um den Faktor 7, wodurch der Richtstrahlwert auf 14 % des Ausgangswerts sinkt. Dies ist ein für den Einsatz im SÄTEM völlig ausreichender Wert, da nach Kapitel 3 aufgrund des Öffnungsfehlerkorrektors der Richtstrahlwert sogar auf 1 % absinken darf,

Kapitel 11

Zusammenfassung

Die Punktauflösungsgrenze eines Transmissionselektronenmikroskops kann durch Korrektur des Öffnungsfehlers des Objektivs deutlich verbessert werden. Von der Arbeitsgruppe um Max Haider wurde 1997 erstmals erfolgreich ein Öffnungsfehlerkorrektor für diesen Mikroskoptyp realisiert [9, 10]. Dieser Korrektor wurde 1990 von Rose vorgeschlagen [12]. Die Punktauflösungsgrenze eines konventionellen Mittelspannungsmikroskops mit einer Elektronenenergie von 200 keV konnte mit seiner Hilfe von 2,6 Å auf 1,2 Å reduziert werden.

Die Auflösung wird dabei nicht mehr länger von der Qualität des Abbildungssystems sondern von der Energiebreite der Quelle begrenzt. Um eine Punktauflösungsgrenze von unter 1 Å zu erreichen, muß die Halbwertsbreite der Energieverteilung (FWHM) der Elektronenquelle von heute 0,7 eV auf mindestens 0,3 eV verringert werden. Trotz vielversprechender Ansätze ist es bis heute nicht gelungen, Quellen zu entwickeln, die eine derart hohe Energieschärfe bei ausreichend hohem Strahlstrom (einige Nanoampere) aufweisen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde deshalb ein Monochromator für Elektronenquellen entworfen, der ein virtuelles Zwischenbild der Quelle mit einer Vergrößerung von Eins abbildet, dabei jedoch alle Elektronen mit einer zu großen Energieabweichung herausfiltert. Um eine ausreichend hohe Dispersion für die Filterung zu erzielen, darf die Energie der Elektronen innerhalb des Monochromators einige Kilovolt nicht überschreiten. Bei einem Mikroskop mit einer Beschleunigungsspannung von 200 kV muß der Monochromator daher bei einer Spannung von nahezu 200 kV gegenüber Erde (dem Objektpotential) arbeiten. Der Betrieb von Konstantstromquellen für magnetische Bauelemente ist auf einer so hohen Spannung gegen Erde technologisch weit aufwendiger als der Betrieb von Konstantspannungsquellen für elektrostatische Elemente. Das vorgestellte System arbeitet

aus diesem Grund rein elektrostatisch. Der Monochromator wurde für eine Halbwertsbreite der gefilterten Energieverteilung von 0,2 eV ausgelegt, um auch die Verbreiterung der Energieverteilung durch die Instabilität der Hauptbeschleunigung aufzufangen.

Ein Monochromator sollte so aufgebaut sein, daß sowohl die Orts- als auch die Winkeldispersion hinter dem Monochromator wieder verschwinden. Hierdurch wird eine Verbreiterung des Austrittsquellbildes und eine Aufweitung des Emissionswinkels durch die verbliebene Energiebreite vermieden, so daß der Richtstrahlwert der Quelle im Rahmen der linearen Abbildungstheorie erhalten bleibt.

Infolge der niedrigen Elektronenenergien ist ein Monochromator anfällig gegenüber einer Energieverbreiterung des Strahls aufgrund von Coulomb-Stößen zwischen den Elektronen (Boersch-Effekt). Der Boersch-Effekt tritt vor allem in der Region von Strahlcrossovern auf, da dort die Elektronendichte am größten ist. Wie in Kapitel 10 gezeigt wurde, ist der entscheidende Effekt nicht, daß der Boersch-Effekt die Energiefilterung wieder zunichte macht. Vielmehr weisen die Elektronen, deren Energie innerhalb des Monochromators durch den Boersch Effekt verändert wurde, eine parasitäre Restdispersion in der Ebene des Austrittsquellbildes auf. Hierdurch wird die Fläche der virtuellen Quelle vergrößert. Dies führt insbesondere bei hohen Strömen zu einem drastischen Verlust an Richtstrahlwert.

Der Monochromator besteht aus zwei Paaren von sektorförmigen, elektrostatischen Ablenkern, die jeweils symmetrisch bezüglich der zentralen Symmetrieebene angeordnet sind (Abbildung 7.2). Die von den Ablenkern erzeugten Dipolfelder krümmen die Mittelachse des Elektronenbündels omega-förmig. Die Energieselektion erfolgt in der Symmetrieebene. Dort ist die Dispersion mit einem Wert von $16,35 \mu\text{m}/\text{eV}$ maximal.

Die Berechnung eines realistischen Systems erfolgte dabei in zwei Schritten. Durch Vernachlässigung der Randfelder (SCOFF-Näherung) können analytische Näherungslösungen für die Monochromatorgeometrie angegeben werden. Hierdurch war es möglich, in vertretbarer Rechenzeit den gesamten Lösungsraum nach einer optimalen Lösung abzusuchen. Im zweiten Schritt wurde mit Hilfe eines Iterationsverfahrens ausgehend von dieser SCOFF-Lösung als Startwert die tatsächliche Elektrodengeometrie berechnet. In Abhängigkeit davon, ob die Öffnungsfehler in der Selektionsebene mit Hilfe von Hexapolfeldern korrigiert werden oder nicht, ergeben sich zwei verschiedene Systeme. Im Falle des korrigierten Systems werden die Krümmungen der Ablenkerelektroden so verändert, daß außer den zur Gaußschen Abbildung notwendigen Dipol- und Quadrupolfeldern auch die zur Korrektur erforderlichen Hexapolfelder entlang der Achse erzeugt werden. Daher sind keine zusätzlichen Bauelemente für das korrigierte System notwendig.

Die Simulation der Felder erfolgt mit Hilfe einer Ersatzladungsmethode. Der Verlauf der optischen Achse wird durch Raytracing bestimmt. Zur Feldsimulation werden alle Bauelemente trianguliert (Approximation durch ein Dreiecksnetz). Die Flächenladungsdichte wird durch eine an den Kanten der Dreiecke stetige und über die Dreiecksflächen lineare Ladungsverteilung angenähert. Der Vorteil dieser Methode ist, daß das Potential eines solchen Dreiecks im Raum *analytisch* darstellbar ist. Deshalb lassen sich alle partiellen Ableitungen des Potentials mit hoher Genauigkeit bestimmen. Zur Berechnung der Bildfehler zweiter und dritter Stufe werden zum Beispiel alle partiellen Ableitungen bis zur vierten Ordnung benötigt. Im Vergleich zur Feldsimulation mit Hilfe von Punktladungen ist die Verwendung von Dreiecken bei ausgedehnten Bauteilen ohne komplexe Oberflächenstruktur (zum Beispiel dünne Blenden) günstiger, da deutlich weniger Ladungselemente benötigt werden.

Um den Boersch-Effekt zu minimieren, wurde der Strahlengang so gewählt, daß innerhalb des Monochromators nur astigmatische, linienförmige reelle Bilder der Quelle (Crossover) auftreten. Zudem ist sowohl das Eintritts- als auch das Austrittsquellbild virtuell. Die bisher vorgestellten Systeme [14, 15, 16] weisen alle stigmatische Bilder der Quelle auf, in denen die Stromdichte deutlich größer ist als in astigmatischen Zwischenbildern.

Mit Hilfe von Monte-Carlo Simulationen konnte gezeigt werden, daß bei großen Strömen im Bereich von 50 nA bis 100 nA die Energieverbreiterung durch den Boersch-Effekt für ein System mit stigmatischen Crossovern fast doppelt so groß ist wie für ein System mit astigmatischen Crossovern. Im Bereich niedriger Ströme (10 nA bis 20 nA) sind stigmatische und astigmatische Crossover hingegen nahezu gleichwertig.

Entscheidend für die Größe der Quellverbreiterung und damit die Größe des Richtstrahlwertverlusts ist jedoch nicht allein die Stärke des Boersch-Effekts in den Crossovern, sondern auch die Größe der zu jedem Crossover korrespondierenden parasitären Restdispersion in der Ebene des Austrittsquellbildes. Je kleiner die Restdispersionen sind, desto geringer ist auch der Verlust an Richtstrahlwert. Daher sind die absolute Größe des Monochromators und damit auch der Absolutwert der Dispersion in der Symmetrieebene so gewählt, daß die Energie-selektionsblende technisch noch problemlos realisiert werden kann (Schlitzbreite etwa 3 μm). Generell sind Systeme mit einer höheren Dispersion in der Mittelebene nicht sinnvoll, weil in solchen Systemen auch besonders hohe parasitäre Restdispersionen auftreten.

Bei einem Strom von 100 nA in der Eintrittsebene des Monochromators wird die Fläche der Quelle in der Austrittsbildebene für das korrigierte und das unkorrigierte System etwa um den Faktor 26 vergrößert, wodurch der Richtstrahlwert

auf etwa 4 % des Ausgangswerts absinkt. Hierbei sind sowohl die Verbreiterung durch den Boersch-Effekt als auch die Verbreiterung durch die Bildfehler zweiter Ordnung berücksichtigt. Der Richtstrahlwert des von Rose 1990 vorgeschlagene Design [16] beträgt bei gleicher Baulänge nur etwa 40 % dieses Werts. Der im Rahmen dieser Arbeit konzipierte Monochromatortyp eignet sich daher besonders für Anwendungen, die große Beleuchtungsströme in Verbindung mit einer geringen Energiebreite der Quelle benötigen. Er ermöglicht bei akzeptabler Beleuchtungszeit auch orts aufgelöste Spektroskopie im Sub-eV Bereich für Anregungsprozesse geringer Wahrscheinlichkeit.

Bei einem Eingangsstrom von 100 nA sind die Akzeptanzwinkel, die der Monochromator verarbeiten muß, bereits so groß, daß für das unkorrigierte System durch den Einfluß der Öffnungsfehler die Breite der Linien crossover in der Selektionsebene in der Größenordnung der Breite des Selektionsschlitzes liegt. Deshalb weist die Energieverteilung keine scharfen Ränder mehr auf, aber die geforderte Halbwertsbreite der Energieverteilung von 0,2 eV ist jedoch gewährleistet. Die Ränder der Energieverteilung des korrigierten Systems sind dagegen deutlich schärfer.

Mit Hilfe der Bildfehlerkoeffizienten zweiter und dritter Stufe wurden für beide Systeme die Toleranzen gegenüber einem lateralen Versatz der Quelle und der Stromselektionsblende abgeschätzt. Das unkorrigierte System erweist sich als weitaus unkritischer gegenüber Fehljustierungen des Beleuchtungssystems als das korrigierte.

Zur Zeit wird von der CEOS GmbH in Heidelberg das unkorrigierte System konstruiert und gebaut. Der Monochromator soll zunächst in einem Mikroskop mit einem neuartigen hochdispersiven Energiefilter eingesetzt werden, das orts aufgelöste Energieverlustspektroskopie im Sub-eV Bereich erlaubt. Auch ein Einsatz in einem Mikroskop mit Öffnungsfehlerkorrektor ist geplant.

Anhang A

Fundamentalbahnen und dispersive Bahn in SCOFF Näherung

Für die axiale Bahn im xz -Schnitt und deren erste Ableitung erhält man

$$\hat{x}_\alpha(\hat{z}) = \begin{cases} \hat{z} + l & : \hat{z} \in I_1 \\ l \cos(\mu_1 \hat{z}) + (1/\mu_1) \sin(\mu_1 \hat{z}) & : \hat{z} \in I_2 \\ l \cos(\mu_1 \phi) + (1/\mu_1) \sin(\mu_1 \phi) \\ + (\hat{z} - \phi) \{ \cos(\mu_1 \phi) - l \mu_1 \sin(\mu_1 \phi) \} & : \hat{z} \in I_3 \\ \{ (1/\mu_1 - l \delta \mu_1) \sin(\mu_1 \phi) \\ + (l + \delta) \cos(\mu_1 \phi) \} \\ \times \cos(\mu_2 (\hat{z} - (\phi + \delta))/r) & : \hat{z} \in I_4 \\ + (r/\mu_2) \{ \cos(\mu_1 \phi) - l \mu_1 \sin(\mu_1 \phi) \} \\ \times \sin(\mu_2 (\hat{z} - (\phi + \delta))/r) & \\ (l + \delta) M_c + (1/\mu_1 - l \delta \mu_1) M_{12} \\ + (r/\mu_2) M_{21} - r l (\mu_1/\mu_2) M_s \\ + \{ M_c - (l + \delta) (\mu_2/r) M_{21} - l \mu_1 M_{12} \\ + (l \delta \mu_1 \mu_2/r - \mu_2/(\mu_1 r)) M_s \} & : \hat{z} \in I_5 \\ \times (\hat{z} - (1 + r) \phi - \delta) & \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

$$\hat{x}'_\alpha(\hat{z}) = \begin{cases} 1 & : \hat{z} \in I_1 \\ -l\mu_1 \sin(\mu_1 \hat{z}) + \cos(\mu_1 \hat{z}) & : \hat{z} \in I_2 \\ -l\mu_1 \sin(\mu_1 \phi) + \cos(\mu_1 \phi) & : \hat{z} \in I_3 \\ -(\mu_2/r) \{ (1/\mu_1 - l\delta\mu_1) \sin(\mu_1 \phi) \\ \quad + (l + \delta) \cos(\mu_1 \phi) \} \\ \quad \times \sin(\mu_2(\hat{z} - (\phi + \delta))/r) & : \hat{z} \in I_4 \\ + \{ \cos(\mu_1 \phi) - l\mu_1 \sin(\mu_1 \phi) \} \\ \quad \times \cos(\mu_2(\hat{z} - (\phi + \delta))/r) \\ M_c - (l + \delta)(\mu_2/r)M_{21} - l\mu_1 M_{12} \\ + (l\delta\mu_1\mu_2/r - \mu_2/(\mu_1 r)) M_s & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} . \quad (\text{A.2})$$

Hierbei wurden die Abkürzungen

$$\begin{aligned} M_c &:= \cos(\mu_1 \phi) \cos(\mu_2 \phi) \quad , & M_s &:= \sin(\mu_1 \phi) \sin(\mu_2 \phi) \quad , \\ M_{12} &:= \sin(\mu_1 \phi) \cos(\mu_2 \phi) \quad , & M_{21} &:= \cos(\mu_1 \phi) \sin(\mu_2 \phi) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

verwendet. Die Intervalle $I_i, i = 1, \dots, 5$ sind in (7.4) definiert. Führt man in den Formeln für \hat{x}_α und \hat{x}'_α die Ersetzungen

$$\mu_1 \rightarrow \mu_2 \quad , \quad \nu_1 \rightarrow \nu_2 \quad (\text{A.4})$$

durch, so ergeben sich die Ausdrücke für die axiale Bahn \hat{y}_β im yz -Schnitt und deren Ableitung \hat{y}'_β . Die Abkürzungen (A.3) gehen durch die Ersetzungen in die Abkürzungen

$$\begin{aligned} N_c &:= \cos(\nu_1 \phi) \cos(\nu_2 \phi) \quad , & N_s &:= \sin(\nu_1 \phi) \sin(\nu_2 \phi) \quad , \\ N_{12} &:= \sin(\nu_1 \phi) \cos(\nu_2 \phi) \quad , & N_{21} &:= \cos(\nu_1 \phi) \sin(\nu_2 \phi) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

über.

Nach Abschnitt 6.4 muß die Feldbahn \hat{x}_γ im xz -Schnitt symmetrisch und die Feldbahn \hat{y}_δ im yz -Schnitt antisymmetrisch zur Selektionsebene z_s gewählt wer-

den. Man erhält für die Feldbahn im xz -Schnitt und ihre erste Ableitung

$$\hat{x}_\gamma(\hat{z}) = \frac{1}{c_\gamma} \times \begin{cases} c_\gamma + (\hat{z} + l) \{ \mu_1 M_{12} + (\mu_2/r) M_{21} - \delta \mu_1 (\mu_2/r) M_s \} & : \hat{z} \in I_1 \\ \{ \cos(\mu_2 \phi) - \delta (\mu_2/r) \sin(\mu_2 \phi) \} \cos(\mu_1(\phi - \hat{z})) \\ - \mu_2 / (\mu_1 r) \sin(\mu_2 \phi) \sin(\mu_1(\phi - \hat{z})) & : \hat{z} \in I_2 \\ \{ \cos(\mu_2 \phi) - \delta (\mu_2/r) \sin(\mu_2 \phi) \} \\ + (\hat{z} - \phi) (\mu_2/r) \sin(\mu_2 \phi) & : \hat{z} \in I_3 \\ \cos(\mu_2(\delta + (1+r)\phi - \hat{z}))/r & : \hat{z} \in I_4 \\ 1 & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

$$\hat{x}'_\gamma(\hat{z}) = \frac{1}{c_\gamma} \times \begin{cases} \mu_1 M_{12} + (\mu_2/r) M_{21} - \delta \mu_1 (\mu_2/r) M_s & : \hat{z} \in I_1 \\ \mu_1 \{ \cos(\mu_2 \phi) - \delta (\mu_2/r) \sin(\mu_2 \phi) \} \sin(\mu_1(\phi - \hat{z})) \\ + (\mu_2/r) \sin(\mu_2 \phi) \cos(\mu_1(\phi - \hat{z})) & : \hat{z} \in I_2 \\ (\mu_2/r) \sin(\mu_2 \phi) & : \hat{z} \in I_3 \\ (\mu_2/r) \sin(\mu_2(\delta + (1+r)\phi - \hat{z}))/r & : \hat{z} \in I_4 \\ 0 & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

mit dem Normierungsfaktor

$$c_\gamma = M_c - \left\{ \frac{\mu_2}{\mu_1 r} - l \delta \mu_1 \frac{\mu_2}{r} \right\} M_s - l \mu_1 M_{12} - (l + \delta) \frac{\mu_2}{r} M_{21} \quad . \quad (\text{A.8})$$

Die Ausdrücke für die Feldbahn im y z -Schnitt und ihre Ableitung lauten

$$\hat{y}_\delta(\hat{z}) = \frac{1}{c_\delta} \times \begin{cases} \{N_c - s\nu_2/rN_{21} - \nu_1(s + \delta)N_{12} \\ + (\delta s\nu_1\nu_2/r - \nu_1r/\nu_2)N_s\}(\hat{z} + l) + c_\delta & : \hat{z} \in I_1 \\ -\{(\delta + s)\cos(\nu_2\phi) + (r/\nu_2 - \delta s\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi)\} \\ \times \cos(\nu_1(\phi - \hat{z})) & : \hat{z} \in I_2 \\ -1/\nu_1\{\cos(\nu_2\phi) - s(\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi)\} \\ \times \sin(\nu_1(\phi - \hat{z})) & : \hat{z} \in I_2 \\ -\{(\delta + s)\cos(\nu_2\phi) + (r/\nu_2 - \delta s\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi)\} \\ + (\hat{z} - \phi)\{\cos(\nu_2\phi) - s(\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi)\} & : \hat{z} \in I_3 \\ -s\cos(\nu_2(\delta + (1 + r)\phi - \hat{z}))/r) \\ -r/\nu_2\sin(\nu_2(\delta + (1 + r)\phi - \hat{z}))/r) & : \hat{z} \in I_4 \\ \hat{z} - \{(1 + r)\phi + \delta + s\} & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

$$\hat{y}'_\delta(\hat{z}) = \frac{1}{c_\delta} \times \begin{cases} N_c - s(\nu_2/r)N_{21} - \nu_1(s + \delta)N_{12} \\ + (\delta s\nu_1\nu_2/r - \nu_1r/\nu_2)N_s & : \hat{z} \in I_1 \\ -\nu_1\{(\delta + s)\cos(\nu_2\phi) + (r/\nu_2 - \delta s\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi)\} \\ \times \sin(\nu_1(\phi - \hat{z})) & : \hat{z} \in I_2 \\ +\{\cos(\nu_2\phi) - s(\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi)\} \\ \times \cos(\nu_1(\phi - \hat{z})) & : \hat{z} \in I_2 \\ \cos(\nu_2\phi) - s(\nu_2/r)\sin(\nu_2\phi) & : \hat{z} \in I_3 \\ -s(\nu_2/r)\sin(\nu_2(\delta + (1 + r)\phi - \hat{z}))/r) \\ + \cos(\nu_2(\delta + (1 + r)\phi - \hat{z}))/r) & : \hat{z} \in I_4 \\ 1 & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

mit dem Normierungsfaktor

$$c_\delta = -(s + \delta + l)N_c + \left\{ \nu_1 l(s + \delta) - \frac{1}{\nu_1} \right\} N_{12} \\ + \left\{ \frac{\nu_2}{r} s(\delta + l) - \frac{r}{\nu_2} \right\} N_{21} + \left\{ \frac{\nu_2}{\nu_1 r} s + \frac{\nu_1 r}{\nu_2} l - l s \delta \nu_1 \frac{\nu_2}{r} \right\} N_s \quad . \quad (\text{A.11})$$

Alle Fundamentalbahnen sind so skaliert, daß sie in der Ebene $\hat{z} = z_i = -l$ des Eintrittsquellbildes die Anfangsbedingungen (4.83) erfüllen.

Ersetzt man mit Hilfe der paraxialen Bahngleichungen (7.14) die in den Integranden von (7.20) vorkommenden Fundamentalbahnen durch ihre zweiten Ableitungen, so kann man die Integrale direkt durch Ableitungen der Fundamentalbahnen an den Ein- und Austrittskanten der Ablenker ausdrücken. Für die normierte Dispersionsbahn und ihre Ableitung ergibt sich

$$\hat{x}_\kappa(\hat{z}) = \begin{cases} 0 & : \hat{z} \in I_1 \\ (1/\mu_1^2)\{-1 + \hat{x}_\gamma(\hat{z})\hat{x}'_{\alpha 1} - \hat{x}_\alpha(\hat{z})\hat{x}'_{\gamma 1}\} & : \hat{z} \in I_2 \\ (1/\mu_1^2)\{\hat{x}_\alpha(\hat{z})(\hat{x}'_{\gamma 2} - \hat{x}'_{\gamma 1}) - \hat{x}_\gamma(\hat{z})(\hat{x}'_{\alpha 2} - \hat{x}'_{\alpha 1})\} & : \hat{z} \in I_3 \\ \hat{x}_\alpha(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\gamma 2} - \hat{x}'_{\gamma 1}) + (r/\mu_2^2)\hat{x}'_{\gamma 3}\} + r/\mu_2^2 \\ - \hat{x}_\gamma(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\alpha 2} - \hat{x}'_{\alpha 1}) + (r/\mu_2^2)\hat{x}'_{\alpha 3}\} & : \hat{z} \in I_4 \\ \hat{x}_\alpha(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\gamma 2} - \hat{x}'_{\gamma 1}) - (r/\mu_2^2)(\hat{x}'_{\gamma 4} - \hat{x}'_{\gamma 3})\} \\ - \hat{x}_\gamma(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\alpha 2} - \hat{x}'_{\alpha 1}) - (r/\mu_2^2)(\hat{x}'_{\alpha 4} - \hat{x}'_{\alpha 3})\} & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

$$\hat{x}'_\kappa(\hat{z}) = \begin{cases} 0 & : \hat{z} \in I_1 \\ (1/\mu_1^2)\{\hat{x}_\gamma(\hat{z})'\hat{x}'_{\alpha 1} - \hat{x}'_\alpha(\hat{z})\hat{x}'_{\gamma 1}\} & : \hat{z} \in I_2 \\ (1/\mu_1^2)\{\hat{x}'_\alpha(\hat{z})(\hat{x}'_{\gamma 2} - \hat{x}'_{\gamma 1}) - \hat{x}'_\gamma(\hat{z})(\hat{x}'_{\alpha 2} - \hat{x}'_{\alpha 1})\} & : \hat{z} \in I_3 \\ \hat{x}'_\alpha(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\gamma 2} - \hat{x}'_{\gamma 1}) + (r/\mu_2^2)\hat{x}'_{\gamma 3}\} \\ - \hat{x}'_\gamma(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\alpha 2} - \hat{x}'_{\alpha 1}) + (r/\mu_2^2)\hat{x}'_{\alpha 3}\} & : \hat{z} \in I_4 \\ \hat{x}'_\alpha(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\gamma 2} - \hat{x}'_{\gamma 1}) - (r/\mu_2^2)(\hat{x}'_{\gamma 4} - \hat{x}'_{\gamma 3})\} \\ - \hat{x}'_\gamma(\hat{z})\{(1/\mu_1^2)(\hat{x}'_{\alpha 2} - \hat{x}'_{\alpha 1}) - (r/\mu_2^2)(\hat{x}'_{\alpha 4} - \hat{x}'_{\alpha 3})\} & : \hat{z} \in I_5 \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

mit den Abkürzungen

$$\hat{x}'_{\alpha i} := \hat{x}'_\alpha(\hat{z}_i) \quad , \quad \hat{x}'_{\gamma i} := \hat{x}'_\gamma(\hat{z}_i) \quad , \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (\text{A.14})$$

für die Werte der ersten Ableitungen der axialen Bahn und der Feldbahn im xz -Schnitt an den Positionen

$$\hat{z}_1 = 0 \quad , \quad \hat{z}_2 = \phi \quad , \quad \hat{z}_3 = \phi + \delta \quad , \quad \hat{z}_4 = (1 + r)\phi + \delta \quad (\text{A.15})$$

der Eintritts- und Austrittskanten der Ablenker.

Anhang B

Potential eines Elementardreiecks

Die analytische Auswertung des Integrals (8.14) ist in [59] ausführlich beschrieben. Hilfreich zur Darstellung des Ausdrucks für das Potential ist die Abkürzung

$$[f] := (f(a_1, b_1, c_1) - f(a_1, b_1, c_2)) - (f(a_2, b_2, c_1) - f(a_2, b_2, c_2)) \quad . \quad (\text{B.1})$$

Die Funktion f hängt dabei von den Parametern

$$\begin{aligned} a_1 &:= \frac{\vec{r}_{23} \vec{e}_{\vec{x}}}{d} \quad , & b_1 &:= a_1 \tilde{Y} - \tilde{X} \quad , & c_1 &:= -\tilde{Y} \\ a_2 &:= \frac{\vec{r}_{13} \vec{e}_{\vec{x}}}{d} \quad , & b_2 &:= a_2 \tilde{Y} - \tilde{X} \quad , & c_2 &:= -(\tilde{Y} + d) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

ab, die die Geometrie des Dreiecks vollständig charakterisieren. Die Höhe d des Dreiecks ist in (8.13) definiert. Man erhält für die modifizierte Potentialfunktion

$$\tilde{\varphi}^{(\Delta)} = \frac{4\pi\epsilon_0}{\sigma^{(0)}} \varphi^{(\Delta)} \quad (\text{B.3})$$

den Ausdruck

$$\tilde{\varphi}^{(\Delta)} = \frac{1}{d} \left\{ (\tilde{Y} + d)[A] + [B] \right\} \quad (\text{B.4})$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned}
A(a, b, c, \tilde{Z}) &:= c \operatorname{arsinh} \frac{ac + b}{\sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2}} - \tilde{Z} \arctan \frac{bc - a\tilde{Z}^2}{\tilde{Z} \sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2 + (ac + b)^2}} \\
&\quad + \frac{b}{\sqrt{1 + a^2}} \operatorname{arsinh} \frac{(1 + a^2)c + ab}{\sqrt{(1 + a^2)\tilde{Z}^2 + b^2}} \quad , \\
B(a, b, c, \tilde{Z}) &:= \frac{c^2}{2} \operatorname{arsinh} \frac{ac + b}{\sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2}} + \frac{\tilde{Z}^2}{2} \operatorname{artanh} \frac{ac + b}{\sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2 + (ac + b)^2}} \\
&\quad + \frac{1}{2(1 + a^2)} \left\{ b \sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2 + (ac + b)^2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{a}{\sqrt{1 + a^2}} ((1 + a^2)\tilde{Z}^2 + b^2) \operatorname{arsinh} \frac{(1 + a^2)c + ab}{\sqrt{(1 + a^2)\tilde{Z}^2 + b^2}} \right\} .
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Die Koordinaten $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ geben die Position des Potentialaufpunkts im Dreieckssystem an. Sie lassen sich mit Hilfe der Beziehungen (8.11) aus den Koordinaten im Laborsystem bestimmen. Die geometrische Bedeutung der Parameter b_1, b_2, c_1 und c_2 ist in Abbildung B.1 dargestellt. Die Funktionen A und B sind auch in der Dreiecksebene ($\tilde{Z} = 0$) wohldefiniert, wenn man von hebbaren Singularitäten entlang der in Abbildung B.1 eingezeichneten Geraden absieht, die weiter unten diskutiert werden. Auch alle partiellen Ableitungen nach b und c bleiben in der Dreiecksebene wohldefiniert.

Zur Berechnung aller für die Fehlerbahnen bis zur dritten Stufe benötigten Multipolmomente benötigt man die partiellen Ableitungen bis zur vierten Ordnung des Potentials eines Elementardreiecks. Zur Minimierung der Rechenzeit ist darauf zu achten, daß sich alle partiellen Ableitungen aus möglichst wenigen gleichen Untertermen darstellen lassen. Um möglichst kompakte Ausdrücke bei den partiellen Ableitungen zu erhalten, ist es sinnvoll, die Funktionen A und B durch die modifizierten Funktionen \tilde{A} und \tilde{B}

$$A(a, b, c, \tilde{Z}) := \operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \tilde{Z} \tilde{A}(a, \tilde{b}, \tilde{c}) \quad , \quad B(a, b, c, \tilde{Z}) := \operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \tilde{Z}^2 \tilde{B}(a, \tilde{b}, \tilde{c}) \tag{B.6}$$

auszudrücken, die von den normierten Parametern

$$\tilde{b} := \frac{b}{\tilde{Z}} \quad , \quad \tilde{c} := \frac{c}{\tilde{Z}} \tag{B.7}$$

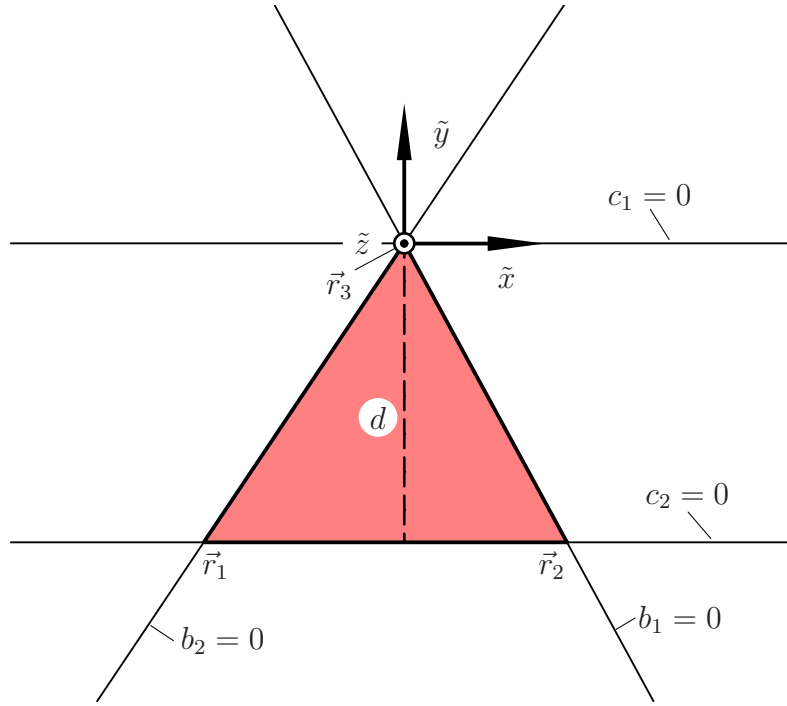


Abbildung B.1: Geometrische Bedeutung der Parameter b_1, b_2, c_1 und c_2 .

abhängen. In den Funktionen \tilde{A} und \tilde{B}

$$\begin{aligned}
 \tilde{A}(a, \tilde{b}, \tilde{c}) &:= \tilde{c} \operatorname{arsinh} \frac{a\tilde{c} + \tilde{b}}{\sqrt{1 + \tilde{c}^2}} - \arctan \frac{\tilde{b}\tilde{c} - a}{\sqrt{1 + \tilde{c}^2 + (a\tilde{c} + \tilde{b})^2}} \\
 &\quad + \frac{\tilde{b}}{\sqrt{1 + a^2}} \operatorname{arsinh} \frac{(1 + a^2)\tilde{c} + a\tilde{b}}{\sqrt{1 + a^2 + \tilde{b}^2}}, \\
 \tilde{B}(a, \tilde{b}, \tilde{c}) &:= \frac{\tilde{c}^2}{2} \operatorname{arsinh} \frac{a\tilde{c} + \tilde{b}}{\sqrt{1 + \tilde{c}^2}} + \frac{1}{2} \operatorname{artanh} \frac{a\tilde{c} + \tilde{b}}{\sqrt{1 + \tilde{c}^2 + (a\tilde{c} + \tilde{b})^2}} \\
 &\quad + \frac{1}{2(1 + a^2)} \left\{ \tilde{b} \sqrt{1 + \tilde{c}^2 + (a\tilde{c} + \tilde{b})^2} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{a}{\sqrt{1 + a^2}} (1 + a^2 + \tilde{b}^2) \operatorname{arsinh} \frac{(1 + a^2)\tilde{c} + a\tilde{b}}{\sqrt{1 + a^2 + \tilde{b}^2}} \right\}
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

kommt \tilde{Z} nicht mehr explizit vor. Mit Hilfe der Beziehungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{b}}{\partial \tilde{X}} &= -\frac{1}{\tilde{Z}} \quad , & \frac{\partial \tilde{b}}{\partial \tilde{Y}} &= \frac{a}{\tilde{Z}} \quad , & \frac{\partial \tilde{b}}{\partial \tilde{Z}} &= -\frac{\tilde{b}}{\tilde{Z}} \\ \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \tilde{X}} &= 0 \quad , & \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \tilde{Y}} &= -\frac{1}{\tilde{Z}} \quad , & \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \tilde{Z}} &= -\frac{\tilde{c}}{\tilde{Z}} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

und den Definitionen (B.6) erhält man für die partiellen Ableitungen erster Ordnung der Funktionen A und B nach den Koordinaten $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ die kompakte Darstellung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}}[A] &= -\operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \left[\frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} \right] \quad , \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{Y}}[A] &= \operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \left[a \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} - \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} \right] \quad , \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}}[A] &= \operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \left[\tilde{A} - \tilde{b} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} - \tilde{c} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} \right] \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{X}}[B] &= -|\tilde{Z}| \left[\frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} \right] \quad , \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{Y}}[B] &= |\tilde{Z}| \left[a \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} - \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{c}} \right] \quad , \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{Z}}[B] &= |\tilde{Z}| \left[2\tilde{B} - \tilde{b} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} - \tilde{c} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{c}} \right] \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Die partiellen Ableitungen höherer Ordnung von $[A]$ und $[B]$ ergeben sich durch sukzessive Anwendung der obigen Ableitungsformeln. Alle partiellen Ableitungen von \tilde{B} , die mindestens eine Ableitung nach \tilde{c} enthalten, lassen sich mit Hilfe der Beziehung

$$\frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{c}} = \tilde{c} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} \quad (\text{B.11})$$

durch die partiellen Ableitungen von \tilde{A} ausdrücken. Für die partiellen Ableitungen

gen erster Ordnung des Potentials – also für das elektrische Feld – erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{X}} &= -\frac{\operatorname{sgn}(\tilde{Z})}{d} \left\{ (\tilde{Y} + d) \left[\frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} \right] + \tilde{Z} \left[\frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} \right] \right\} , \\
\frac{\partial \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{Y}} &= \frac{\operatorname{sgn}(\tilde{Z})}{d} \left\{ \tilde{Z}[\tilde{A}] + \tilde{Z} \left[a \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} - \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{c}} \right] + (\tilde{Y} + d) \left[a \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} - \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} \right] \right\} , \\
\frac{\partial \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{Z}} &= \frac{\operatorname{sgn}(\tilde{Z})}{d} \left\{ (\tilde{Y} + d) \left[\tilde{A} - \tilde{b} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} - \tilde{c} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} \right] + \tilde{Z} \left[2\tilde{B} - \tilde{b} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} - \tilde{c} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{c}} \right] \right\} .
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Die benötigten partiellen Ableitungen von \tilde{A} und \tilde{B} lauten

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{b}} &= \frac{1}{1+a^2} \operatorname{arsinh} \frac{(1+a^2)\tilde{c} + a\tilde{b}}{\sqrt{1+a^2+\tilde{b}^2}} , \\
\frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} &= \operatorname{arsinh} \frac{a\tilde{c} + \tilde{b}}{\sqrt{1+\tilde{c}^2}} , \\
\frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{b}} &= \frac{1}{1+a^2} \left\{ \sqrt{1+\tilde{c}^2 + (a\tilde{c} + \tilde{b})^2} - \frac{a\tilde{b}}{\sqrt{1+a^2}} \operatorname{arsinh} \frac{(1+a^2)\tilde{c} + a\tilde{b}}{\sqrt{1+a^2+\tilde{b}^2}} \right\} , \\
\frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{c}} &= \tilde{c} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{c}} .
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Die Ausdrücke für die partiellen Ableitungen weisen viele gemeinsame Unterterme auf, die jeweils nur einmal berechnet werden müssen. Dies setzt sich auch bei den höheren partiellen Ableitungen fort.

Die kompakte Darstellung über die modifizierten Funktionen \tilde{A} und \tilde{B} eignet sich zwar gut zur Berechnung der Ableitungen, die auftretenden Ausdrücke sind jedoch durch die Verwendung der auf \tilde{Z} normierten Parameter (B.7) in der Ebene des Dreiecks ($\tilde{Z} = 0$) nicht definiert. Es ist daher sinnvoll, die partiellen Ableitungen zur numerischen Auswertung wieder auf den Parametersatz a, b, c anstelle von a, \tilde{b}, \tilde{c} umzuschreiben.

Alle partiellen Ableitungen der Funktionen A und B nach den Parametern b und c

$$\alpha_{lm} := \frac{\partial^l A}{\partial b^l \partial c^m} , \quad \beta_{lm} := \frac{\partial^l B}{\partial b^l \partial c^m} , \quad l, m \geq 0 \tag{B.14}$$

sind in der gesamten Dreiecksebene ($\tilde{Z} = 0$) mit Ausnahme der in Abbildung B.1 eingezeichneten Linien wohldefiniert und von Null verschieden. Aus (B.6) ergeben sich die Zusammenhänge

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{l+m} \tilde{A}}{\partial \tilde{b}^l \partial \tilde{c}^m} &= \operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \tilde{Z}^{l+m-1} \alpha_{lm} \quad , \\ \frac{\partial^{l+m} \tilde{B}}{\partial \tilde{b}^l \partial \tilde{c}^m} &= \operatorname{sgn}(\tilde{Z}) \tilde{Z}^{l+m-2} \beta_{lm} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

zwischen den partiellen Ableitungen der Funktionen A , B , \tilde{A} und \tilde{B} . Mit Hilfe von α_{lm} und β_{lm} erhält man für die Ableitungen erster Ordnung des Potentials

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{X}} &= -\frac{1}{d} \left\{ (\tilde{Y} + d) [\alpha_{10}] + [\beta_{10}] \right\} \quad , \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{Y}} &= \frac{1}{d} \left\{ [\alpha_{00}] + [a\beta_{10} - \beta_{01}] + (\tilde{Y} + d) [a\alpha_{10} - \alpha_{01}] \right\} \quad , \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{Z}} &= \frac{1}{d} \frac{1}{\tilde{Z}} \left\{ (\tilde{Y} + d) [\alpha_{00} - b\alpha_{10} - c\alpha_{01}] + [2\beta_{00} - b\beta_{10} - c\beta_{01}] \right\} \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Die zur Darstellung benötigten Funktionen lauten

$$\begin{aligned} \alpha_{00} &= A(a, b, c, \tilde{Z}) \quad , \\ \alpha_{10} &= \frac{1}{1+a^2} \operatorname{arsinh} \frac{(1+a^2)c + ab}{\sqrt{(1+a^2)\tilde{Z}^2 + b^2}} \quad , \\ \alpha_{01} &= \operatorname{arsinh} \frac{ac + b}{\sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2}} \quad , \\ \beta_{00} &= B(a, b, c, \tilde{Z}) \quad , \\ \beta_{10} &= \frac{1}{1+a^2} \left\{ \sqrt{\tilde{Z}^2 + c^2 + (ac+b)^2} - \frac{ab}{\sqrt{1+a^2}} \operatorname{arsinh} \frac{(1+a^2)c + ab}{\sqrt{(1+a^2)\tilde{Z}^2 + b^2}} \right\} \quad , \\ \beta_{01} &= c\alpha_{01} \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Mit Hilfe des am Beispiel der partiellen Ableitungen erster Ordnung demonstrierten Verfahrens lassen sich kompakte Ableitungsformel auch für die höheren partiellen Ableitungen bestimmen. Schwierigkeiten bei der Auswertung in der

Dreiecksebene bereiten alle partiellen Ableitungen, bei denen nach \tilde{Z} differenziert wird. In diesen Fällen treten Terme der Struktur

$$\frac{1}{\tilde{Z}^n}[C] \quad (\text{B.18})$$

auf. Die Funktion C setzt sich hierbei aus Linearkombinationen von α_{lm} und β_{lm} mit Polynomen in a , b und c als Vorfaktoren zusammen. Für $\tilde{Z} = 0$ ist es daher nicht möglich, alle benötigten Terme $[\alpha_{lm}]$ einzeln zu berechnen und hieraus die partiellen Ableitungen zusammenzusetzen, da die einzelne Terme für $\tilde{Z} \rightarrow 0$ nicht notwendigerweise mit der Ordnung n gegen Null gehen. Es läßt sich jedoch stets zeigen, daß für das Gebiet außerhalb des Dreiecks die Gesamtfunktion C/\tilde{Z}^n einen endlichen Grenzwert für $\tilde{Z} \rightarrow 0$ besitzt und somit die partielle Ableitung existiert.

Liegt der Potentialaufpunkt auf einer der vier Geraden in der Ebene des Dreiecks ($\tilde{Z} = 0$), die durch $b_i = 0, i = 1, 2$ und $c_i = 0, i = 1, 2$ definiert sind (Abbildung B.1), treten Divisionen durch Null bei der Auswertung der Ausdrücke von α_{lm} und β_{lm} auf. Mit Hilfe von Grenzwertbetrachtungen läßt sich jedoch zeigen, daß außerhalb der Fläche des Dreiecks sämtliche auftretenden Singularitäten hebbar sind. Es lassen sich Ersatzausdrücke für das Potential entlang der Geraden herleiten. Alle partiellen Ableitungen sind somit – wie von der Physik gefordert – außerhalb des Dreieck auch entlang der vier Geraden wohldefiniert.

Bei der Berechnung der partiellen Ableitungen wird geprüft, ob der Potentialaufpunkt in der Dreiecksebene und auf einer der vier Geraden liegt. Ist dies der Fall, wird die Ableitung mit Hilfe des entsprechenden Ersatzausdrucks berechnet.

Aus der Laplace-Gleichung

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{X}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{Y}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}^{(\Delta)}}{\partial \tilde{Z}^2} = 0 \quad (\text{B.19})$$

lassen sich Verknüpfungen zwischen den partiellen Ableitungen höherer Ordnung ableiten, mit deren Hilfe der Rechenaufwand deutlich reduziert werden kann. Dies ist besonders vorteilhaft bei der Berechnung partieller Ableitungen, die Differentiationen nach \tilde{Z} enthalten. Wie weiter oben gezeigt wurde, erfordert eine direkte Berechnung dieser Ableitungen innerhalb der Dreiecksebene Ausnahmebehandlungen. Mit Hilfe der Laplace-Gleichung können einige dieser Ableitungen unmittelbar aus partiellen Ableitungen nach \tilde{X} und \tilde{Y} berechnet werden, für die solche Ausnahmebehandlungen nicht erforderlich sind.

Verwendet man als Kontrollpunkte für das Potential die Vertices der Triangulation, so benötigt man zur Berechnung der Matrixwerte $\varphi_i(\vec{r}_j)$ des linearen Gleichungssystems (8.6) das Potential eines Elementardreiecks in allen Eckpunkten.

Fällt der Potentialaufpunkt $\vec{\tilde{R}}$ mit einem Eckpunkt zusammen, so gilt für die Parameter b_1, b_2, c_1 und c_2

$$\begin{aligned}\vec{\tilde{R}} = \vec{r}_1 &\Leftrightarrow b_2 = 0, c_2 = 0, \tilde{Z} = 0, \\ \vec{\tilde{R}} = \vec{r}_2 &\Leftrightarrow b_1 = 0, c_2 = 0, \tilde{Z} = 0, \\ \vec{\tilde{R}} = \vec{r}_3 &\Leftrightarrow b_1 = 0, b_2 = 0, c_1 = 0, \tilde{Z} = 0.\end{aligned}\tag{B.20}$$

Mit Hilfe von Grenzwertbetrachtungen erhält man aus (B.4) für die Werte des Potentials in den Ecken

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}^{(\Delta)}(\vec{r}_1) &= -\frac{d}{2(1+a_1)^{\frac{3}{2}}}\left\{\operatorname{sgn}(a_1-a_2)(a_1-a_2)^2\right. \\ &\quad \times \left[a_1\left(\operatorname{arsinh}\frac{1+a_1a_2}{a_1-a_2} + \operatorname{arsinh}(a_1)\right) - \sqrt{1+a_1^2}\right] \\ &\quad \left.+ (a_1-a_2)\sqrt{1+a_1^2}\sqrt{1+a_2^2}\right\}, \\ \tilde{\varphi}^{(\Delta)}(\vec{r}_3) &= \frac{d}{2}\{\operatorname{arsinh}(a_2) - \operatorname{arsinh}(a_1)\}.\end{aligned}\tag{B.21}$$

Vertauscht man im Ausdruck für das Potential im Eckpunkt \vec{r}_1 die Parameter a_1 und a_2 und multipliziert das Ergebnis mit -1 , so erhält man den Ausdruck für das Potential im Eckpunkt \vec{r}_2 :

$$\tilde{\varphi}^{(\Delta)}(\vec{r}_2) = -\tilde{\varphi}^{(\Delta)}(\vec{r}_1)|_{a_1 \leftrightarrow a_2}.\tag{B.22}$$

Anhang C

Bildfehler des realistischen Designs

	Ebene z_s	Ebene z_f
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}}$	-28,801	0
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}}$	-14,422	0
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\gamma}}$	8,030	25,347
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\delta}}$	3,332	10,518
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\gamma}}$	-0,574	0
$\hat{C}_{\hat{\delta}\hat{\delta}}$	-0,647	0
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\kappa}}$	-2,852	0
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\kappa}}$	14,078	44,439
$\hat{C}_{\hat{\kappa}\hat{\kappa}}$	-2,228	0
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}}$	-14,707	0
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\delta}}$	5,711	-10,518
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\gamma}}$	3,431	-6,537
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\kappa}}$	1,079	1,763
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\delta}}$	-0,293	0
$\hat{C}_{\hat{\delta}\hat{\kappa}}$	-1,375	0

	Ebene z_s	Ebene z_f
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\alpha}}$	228,890	-429,662
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\beta}}$	162,336	-263,552
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\gamma}}$	-159,963	160,612
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}\hat{\gamma}}$	-27,702	-7,043
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\delta}}$	-18,510	133,300
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\gamma}\hat{\gamma}}$	37,413	167,215
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\delta}\hat{\delta}}$	2,766	20,702
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}}$	2,584	31,025
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\gamma}\hat{\gamma}}$	-3,156	0,449
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\delta}\hat{\delta}}$	-0,934	-2,426
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\kappa}}$	-91,350	281,594
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}\hat{\kappa}}$	-9,472	-81,896
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\gamma}\hat{\kappa}}$	54,981	285,007
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\kappa}}$	-13,988	-45,171
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\gamma}\hat{\kappa}}$	-8,932	-10,796
$\hat{C}_{\hat{\delta}\hat{\delta}\hat{\kappa}}$	-1,451	-7,494
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\kappa}\hat{\kappa}}$	51,091	260,204
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\kappa}\hat{\kappa}}$	-19,621	-34,400
$\hat{C}_{\hat{\kappa}\hat{\kappa}\hat{\kappa}}$	-16,351	-24,707
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\beta}}$	-114,622	263,494
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}\hat{\beta}}$	-16,076	43,696
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\alpha}\hat{\delta}}$	-35,261	11,336
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\beta}\hat{\delta}}$	8,701	-17,191
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\gamma}}$	0,418	-82,846
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\gamma}\hat{\delta}}$	20,317	-31,029
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\gamma}}$	2,285	-20,235
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\delta}\hat{\delta}}$	5,061	0,315
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\gamma}\hat{\delta}}$	-2,754	0,498
$\hat{C}_{\hat{\delta}\hat{\delta}\hat{\delta}}$	0,874	0,550
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\kappa}}$	128,693	-145,252
$\hat{C}_{\hat{\alpha}\hat{\delta}\hat{\kappa}}$	26,996	45,175
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\kappa}}$	-22,740	-26,322
$\hat{C}_{\hat{\gamma}\hat{\delta}\hat{\kappa}}$	-5,643	7,835
$\hat{C}_{\hat{\beta}\hat{\kappa}\hat{\kappa}}$	-29,457	-97,755
$\hat{C}_{\hat{\delta}\hat{\kappa}\hat{\kappa}}$	-9,387	4,981

Tabelle C.1: Normierte Fehlerkoeffizienten zweiter und dritter Stufe des realistischen Systems.

Literaturverzeichnis

- [1] Abbe, E. (1873). *Die optischen Hilfsmittel der Mikroskopie*. Bericht über die wissenschaftlichen Apparate auf der Londoner internationalen Ausstellung im Jahre 1876. Hrsg. A. W. Hofmann (Braunschweig, 1878). **383 ff.** [1](#)
- [2] Abbe, E. (1879). Journ. Roy. Micr. Soc. 2. **812 ff.** [1](#)
- [3] de Broglie, L. (1925). Ann. Physique 3. **22 ff.** [2](#)
- [4] Busch, H. (1927). Arch. Elektrotech. 18. **583 ff.** [2](#)
- [5] Ruska, E. (1934). Z. Phys. 87, **580 ff.** [2](#)
- [6] Scherzer, O. (1936). Z. Phys. 101. **593 ff.** [2](#), [7](#)
- [7] Scherzer, O. (1947). Optik 2. **114 ff.** [2](#)
- [8] Rose, H. (1971). Optik 34. **285 ff.** [3](#)
- [9] Haider, M. et. al. (1998). Ultramicroscopy 75. **53 ff.** [3](#), [17](#), [17](#), [149](#)
- [10] Haider, M. et. al. (1998). Nature 392. **768 ff.** [3](#), [17](#), [149](#)
- [11] Rose, H. (1981). Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 187. **187 ff.** [3](#), [17](#)
- [12] Rose, H. (1990). Optik 85. **19 ff.** [3](#), [17](#), [149](#)
- [13] Uhlemann, S. (1995). Dissertation, TU Darmstadt, (D 17). **96.** [3](#), [18](#)
- [14] Rose, H. (1990). Optik 84. **91 ff.** [3](#), [25](#), [151](#)
- [15] Plies, E. (1978). „Proc. 9th Int. Congr. on Electron Microscopy“ (Toronto). Vol 1. **50 ff.** [3](#), [26](#), [151](#)
- [16] Rose, H. (1990). Optik 85. No. 3. **95 ff.** [3](#), [26](#), [134](#), [151](#), [152](#)
- [17] Scherzer, O. (1949). J. Appl. Phys. 20. **20 ff.** [8](#), [11](#), [16](#)

- [18] Goodman, J. W. (1968). *Introduction to Fourier Optics*. Mac Graw Hill, San Francisco. 8
- [19] Hawkes, P. W. and Kasper, E. (1994). *Principles of Electron Optics, Vol. 3, Wave Optics*. Academic Press, New York. 8
- [20] Reimer, L. (1984). *Transmission Electron Microscopy*. Springer-Verlag. 219 ff. 10
- [21] Hanßen, K.J. und Trepte, L. (1971). Optik 32. 519 ff. 10
- [22] Kahl, F. und Rose, H. (1995). *Advances in Imaging and Electron Physics, Vol. 94*. Academic Press, New York. 197 ff. 10, 14
- [23] Uhlemann, S. (1999). Persönliche Mitteilungen. 10
- [24] Born und Wolf (1964). *Principles of Optics, 3. edition*. Pergamon Press. 424–428. 11
- [25] Phillip, F. (1994). Ultramicroscopy 56, 1 ff. 13
- [26] Schiske, P. „Proc. 4th Eur. Conf. on Electron Microscopy“ (Rome). Vol 1. 145 ff. 14
- [27] Coene, W., Janssen, A., de Beeck, O., and Van Dyck, D. (1992). Phys. Rev. Lett. 96. 3743 ff. 14
- [28] Saxton, W. O. (1994). Ultramicroscopy 55. 171 ff. 14
- [29] Gabor D. (1949). Proc. Roy. Soc. A 197. 454 ff. 14
- [30] Hawkes, P. W. and Kasper, E. (1994). *Principles Of Electron Optics, Vol. 3, Wave Optics*. Academic Press, New York. 14
- [31] Leith, E. N. and Upatnieks, J. (1962). J. Opt. Soc. Am. 52. 1123 ff. 14
- [32] Lichte, H. (1991). *Advances in Optical and Electron Microscopy, Vol. 12*. (T. Mulvey, ed.). 25 ff. Academic Press, New York. 14
- [33] Lichte, H. (1991). Ultramicroscopy 38. 13 ff. 15
- [34] Tonomura, A. (1993). *Electron Holography*. Springer Series in Optical Sciences. Springer-Verlag, Berlin. 14
- [35] Rempfer, G. F. und Mauck, M. S. (1992). Optik 92. 3 ff. 17
- [36] Preikszas, D. und Rose, H. (1997). J. Electron Micros. 1. 1 ff. 17
- [37] Rose, H. und Preikszas, D. (1992). Optik 92. 31 ff. 17

- [38] Fink, R., Weiss, M. R., Umbach, E. et al. (1997). J. Electron Spectrosc. 84. **231 ff.** 17
- [39] Shao, Z. (1988). Optik 80. **61 ff.** 17
- [40] Fink, H. W. (1990). Phys. Rev. Lett. 65, **1204 ff.** 19
- [41] Rose, H. (1995), Skriptum zur Vorlesung *Nichtlineare Teilchenoptik* an der TU Darmstadt, **38 ff.** 21
- [42] Lejeune, C. und Aubert, J. (1980). In *Applied Charged Particle optics*. (A. Septier, ed.), Part A. Academic Press, New York. **159 ff.** 21
- [43] Uhlemann, S. und Rose, H. (1994). Optik 96. **163 ff.** 22
- [44] Uhlemann, S. (1995). Dissertation, TU Darmstadt, (D 17). **Kap. 7.** 22
- [45] Bronstein, I. und Semendjajew, K. A. (1987). *Taschenbuch der Mathematik*, 23. Auflage. Verlag Harri Deutsch. **595 ff.** 31
- [46] Schmutzer, E. (1989). *Grundlagen der Theoretischen Physik Bd. 1*, BI Wissenschaftsverlag, **147 ff.** 33, 36
- [47] Bjorken, J. D. und Drell, S. D. (1990). *Relativistische Quantenmechanik*, BI Wissenschaftsverlag. 36
- [48] Goldstein, H. (1980). *Classical Mechanics, second edition*, Addison–Wesley, **320 ff.** 36
- [49] Rose, H. (1994), Skriptum zur Vorlesung *Teilchenoptik* an der TU Darmstadt, **53 ff.** 36
- [50] Goldstein, H., (1980). *Classical Mechanics, second edition*, Addison–Wesley, **61.** 37
- [51] Rose, H. (1994). Skriptum zur Vorlesung *Teilchenoptik* an der TU Darmstadt. **19 ff.** 39
- [52] Lanio, S., (1986). Dissertation, TU Darmstadt (D17) 47
- [53] Rose, H. (1987). Nucl. Instr. Meth. A 258, **374 ff.** 47, 50
- [54] Uhlemann, S., (1995). Dissertation, TU Darmstadt (D17). **29 ff.** 48
- [55] Rose, H. und Petri, U. (1971). Optik 34. **151 ff.** 50
- [56] Plies, E. und Typke, D. (1978). Z. Naturforsch. 33a, **1369.** 55
- [57] Plies, E. und Rose, H. (1971). Optik 34. **171 ff.** 61, 61

- [58] Preikszas, H. (1995). Dissertation, TU Darmstadt, (D 17). **154 ff.** 90
- [59] Eupper, M. (1985). Dissertation. Fakultät für Physik, Universität Tübingen. **53 ff.** 90, 94, 159
- [60] Hairer, E., Nørsett, S. P., Wanner, G. (1991). *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York. **181 ff.** 98, 144
- [61] Shewchuk, J. R. (1996). Lecture Notes in Computer Science, Vol. 1148. Springer Verlag. **203 ff.** 104
- [62] Jackson, J. D. (1962). *Classical Electrodynamics*, 2nd ed. John Wiley & Sons, Inc., New York. **75 ff.** 104
- [63] Bronstein, I. und Semendjajew, K. A. (1987). *Taschenbuch der Mathematik*, 19. Auflage. Verlag Harri Deutsch. **785 ff.** 110
- [64] Weidenhausen, A., Spehr, R. und Rose, H. (1985). Optik 69. **126 ff.** 133
- [65] Rose, H., Spehr, R. (1980). Optik 57, **339 ff.** 19, 134
- [66] Rose, H. und Spehr, R. (1983). *Adv. Electron. Electron Phys., Suppl. 13 C*. (A. Septier, ed.). Academic Press, New York. **475 ff.** 19, 23, 134
- [67] van Leeuwen, J. M. J. und Jansen, G. H. (1983). Optik 65. **179 ff.** 134
- [68] Jansen, G. H., von Leeuwen, M. J. und van der Mast, K. D. (1983). Microcircuit Engineering. **99 ff.** 134
- [69] Spehr, R. (1985). Microelectronic Engineering 3. **61 ff.** 134

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Dr. H. Rose für die Anregung zu dieser Arbeit und für zahlreiche fruchtbare Diskussionen, die zu ihrem Gelingen maßgeblich beigetragen haben.

Bedanken möchte ich mich auch bei Herrn Dr. S. Uhlemann von der CEOS GmbH für viele wertvolle Hinweise auf elektronenoptischem und bautechnischem Gebiet.

Eine große Hilfe waren mir auch Herr Dipl.–Phys. P. Hartel, Herr Dipl.–Phys. C. Weissbäcker und Herr Dipl.–Phys. H. Müller, die mich freundlicherweise beim Lektorieren der vorliegenden Arbeit unterstützt haben. Hierfür möchte ich ihnen herzlich danken.

Auch allen übrigen Mitgliedern der Arbeitsgruppe gilt mein Dank. Durch die gute Atmosphäre in der Gruppe und viele anregende Diskussionsrunden in den Teestunden war ein sehr angenehmes Arbeiten möglich.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die finanzielle Unterstützung.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name:	Frank Kahl
Geburtsdatum:	18. 09. 1967
Geburtsort:	Saarbrücken
Familienstand:	ledig, keine Kinder
Staatsangehörigkeit:	deutsch

Ausbildung

1974 – 1978	Grundschule in Breitfurt (Saarland)
1978 – 1981	Hofenfels-Gymnasium in Zweibrücken
1981 – 1987	Staatliches Gymnasium in Diez/Lahn Abschluß: Abitur (Gesamtnote 1,2)
1987 – 1988	Grundwehrdienst in Diez/Lahn
1988 – 1994	Studium der Physik an der TU Darmstadt
1990	Abschluß des Vordiploms
Dezember 1994	Abschluß des Diploms Titel der Diplomarbeit: „Verfahren der hochauflösenden Elektronenholographie“
1994 – 29. 11. 1999	Promotion in theoretischer Physik an der TU Darmstadt Titel der Dissertation: „Design eines Monochro- mators für Elektronenquellen“

Beruflicher Werdegang

1991 – 1993	Studentische Hilfskraft: Betreuung von Übungsgruppen
seit 01. 01. 1994	Wissenschaftlicher Mitarbeiter der Arbeitsgruppe „Licht- und Teilchenoptik“ von Professor Dr. H. Rose an der TU Darmstadt

Darmstadt, den 1. Februar 2000

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides Statt, daß ich die vorliegende Arbeit unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel selbständig angefertigt und bisher keinen Promotionsversuch unternommen habe.

Darmstadt, den 1. Februar 2000

